



Open Archive Toulouse Archive Ouverte

OATAO is an open access repository that collects the work of Toulouse researchers and makes it freely available over the web where possible

This is a publisher's version published in: <https://oatao.univ-toulouse.fr/23328>

To cite this version:

Colin, Catherine and Goyeau, Benoit. Approche multi-échelle et phénomènes de transport en changement de phase (2016). In: Les changements de phase solide-liquide-vapeur. Tome 1, Fondements et applications. CNRS Éditions, Paris, 249-286. ISBN 978-2-271-07735-6

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository administrator: tech-oatao@listes-diff.inp-toulouse.fr

Chapitre 6

Approche multi-échelle et phénomènes de transport en changement de phase

Catherine COLIN¹, Benoît GOYEAU²

6.1 PROBLÉMATIQUE MULTI-ÉCHELLE

Les mécanismes de changement de phase solide-liquide (fusion, solidification, dissolution) ou liquide-vapeur (écoulements diphasiques) sont présents dans de nombreuses situations industrielles : générateurs de vapeur des centrales nucléaires, échangeurs thermiques (refroidissement par film, condenseurs), métallurgie (élaboration des matériaux), moteurs à combustion interne (aéronautique, automobile), transport pétrolier en conduite (production de vapeur par dépressurisation), ... L'une des particularités de ces mécanismes de changement de phase réside dans leur caractère multi-échelle. Par exemple, la solidification des mélanges multi-constituants fait intervenir au moins trois échelles qui sont celle de la dendrite ($\sim 100 \mu\text{m}$), celle de la zone de croissance colonnaire (1-10 mm), et enfin celle du lingot (1 à 100 cm). De la même manière, dans les écoulements diphasiques, différentes échelles interviennent : taille des bulles, gouttelettes (100 μm à quelques mm), épaisseurs des films liquide ou vapeur en paroi ($\sim 100 \mu\text{m}$), diamètre du tube (quelques mm à plusieurs cm).

Cette caractéristique rend réductible toute représentation numérique par simulation directe (DNS) de ces phénomènes à l'échelle du système. Une alternative consiste à proposer une description macroscopique obtenue par homogénéisation spatiale et/ou temporelle des équations locales. Dans ces conditions, la qualité des représentations macroscopiques dépend fortement de leur capacité à prendre en compte autant que faire se peut la géométrie et la physique locales (géométrie des dendrites, tortuosité, échanges interfaciaux, phénomènes de dispersion, transferts de masse, quantité de mouvement et énergie à l'échelle des bulles ou des films) dans les équations de bilans moyennées et plus particulièrement dans les propriétés effectives de transport (perméabilité, conductivité effective, coefficient de diffusion-dispersion, frottement pariétal, coefficient d'échange) obtenues à l'aide de lois ou de problèmes de fermeture.

1. Institut de Mécanique des Fluides – Université de Toulouse – Allée du Professeur Camille Soula – 31400 Toulouse. Email : catherine.colin@imft.fr.

2. Laboratoire EM2C – Ecole Centrale Paris, Grande Voie des Vignes – 92295 Châtenay-Malabry. Email : benoit.goyeau@ecp.fr.

Quel que soit le problème considéré, le principe du changement d'échelle consiste à effectuer des moyennes des équations de transport locales sur un volume élémentaire représentatif (prise de moyenne volumique, Whitaker, 1999) ou sur un ensemble de réalisations où l'on suppose l'ergodicité (moyennes statistiques ou temporelles). Ces différentes techniques de changement d'échelle sont mises en œuvre sur les équations locales dont la forme générique parabolique s'écrit³ :

$$\frac{\partial(\phi_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \mathbf{u}_k) = -\nabla \cdot (\mathbf{\Gamma}_k) + \Pi_k \quad (6.1)$$

où ϕ_k désigne une variable générique extensive de la phase k (quantité de mouvement, enthalpie, soluté, masse). $\mathbf{\Gamma}_k$ représente un flux diffusif et Π_k un terme source ou puits. Ces équations de conservation sont associées à un ensemble de conditions limites décrivant les échanges interfaciaux et dont la forme générale a pour expression :

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_i - 2\kappa \mathbf{\Gamma}_i \cdot \mathbf{n}_{ik} + \sum_k [\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \mathbf{\Gamma}_k] \cdot \mathbf{n}_{ik} \quad (6.2)$$

où $\mathbf{\Gamma}_i$ et \mathbf{u}_i désignent respectivement le flux à l'interface et la vitesse interfaciale. Dans la condition (6.2), \mathbf{n}_{ik} représente la normale extérieure à la phase k et κ la courbure de l'interface. La prise de moyennes spatiales et/ou temporelles de l'équation (6.1) conduit à la forme macroscopique générale :

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\phi_k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\phi_k \mathbf{u}_k} - \alpha_k \overline{\mathbf{\Gamma}_k}) - \alpha_k \overline{\Pi_k} + \alpha_i \overline{[\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \mathbf{\Gamma}_k] \cdot \mathbf{n}_{ik}} = 0 \quad (6.3)$$

où α_k est la moyenne temporelle de la fonction indicatrice de phase (cas liquide-vapeur). Dans cette équation, la notation $\overline{\phi}$ désigne la moyenne spatiale ou temporelle⁴. Dans la plupart des applications, les écoulements liquide-vapeur sont turbulents, ce qui nécessite de travailler avec des équations moyennées dans le temps. En outre ces écoulements sont aussi caractérisés par une vitesse de déplacement de l'interface qui peut être rapide. Dans une approche eulérienne, les phases liquide et vapeur sont présentes alternativement en un point. Le taux de présence de phase en un point est également pris en compte dans la moyenne temporelle des équations comme on le verra dans le paragraphe 6.2.

Cette introduction est une présentation rapide de la problématique commune entre les mécanismes de changement d'état solide-liquide et liquide-vapeur. Leurs modélisations spécifiques font l'objet des sections suivantes. Ces deux présentations font nécessairement des liens avec les chapitres sur l'ébullition et la condensation (tome II, partie 1). Du point de vue de la solidification, signalons que l'une des applications concerne la solidification du corium dans le cadre du scénario

3. Un rappel concernant l'établissement de l'équation de conservation pour un écoulement diphasique est proposé en annexe.

4. Les notations adoptées dans l'équation (3) pour définir les moyennes spatiales ou temporelles sont celles utilisées dans la section concernant les écoulements diphasiques (§ section 2). Ces notations diffèrent dans le cas du changement de phase solide/liquide (§ section 3) où la moyenne volumique de la grandeur générique ϕ_k est notée $\langle \phi_k \rangle$.

d'un accident grave d'un réacteur (chapitre 4, tome I, partie 1). Cette problématique a fait l'objet d'un certain nombre de travaux au sein de l'Institut de Radioprotection et Sécurité Nucléaire (IRSN).

6.2 MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES GAZ-LIQUIDE

Les écoulements diphasiques liquide-gaz ou liquide-vapeur sont présents dans de nombreuses situations industrielles : les générateurs de vapeur des centrales nucléaires, les échangeurs thermiques (refroidissement par film, condenseurs), les moteurs à combustion interne (aéronautique, automobile), le transport pétrolier en conduite (production de vapeur par dépressurisation), le génie des procédés (colonnes à bulles, traitement des eaux par bullage). Plusieurs questions fondamentales se posent lorsque l'on aborde les écoulements diphasiques. Quelle est la répartition spatio-temporelle des différentes phases ? Comment prédire le régime d'écoulement observé (bulles, poches-bouchons, phases séparées) ? L'écoulement est-il stable ? Quels sont les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases ?

La compréhension du fonctionnement et le dimensionnement des systèmes diphasiques nécessitent l'utilisation de modèles d'écoulements polyphasiques permettant de quantifier les échanges de masse, de quantité de mouvement et de chaleur entre les phases et avec le milieu extérieur. Ces modèles reposent sur l'écriture d'équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour chacune des phases. On distingue différents types d'écriture de ces équations et différents niveaux de modélisation :

- les équations phasiques locales et instantanées (6.1) et (6.2) ;
- les équations phasiques locales moyennées, obtenues après une moyenne temporelle (6.3) ;
- les équations filaires intégrées dans la section de la conduite (moyenne spatiale des équations précédentes).

La moyenne des équations dans le temps ou dans l'espace conduit à une perte d'informations qu'il faut palier par l'écriture de lois de fermeture. Certains codes de calculs industriels résolvent les équations phasiques moyennées. On peut par exemple citer le code NEPTUNE co-développé par EDF, le CEA, l'IRSN et AREVA pour une description eulérienne locale des écoulements liquide-vapeur. La résolution d'équations phasiques locales n'est cependant pas toujours requise par l'ingénieur. On peut avoir recours à des équations intégrées dans la section de la conduite pour caractériser globalement les pertes de pression et les transferts thermiques. Ce sont ces équations que résout par exemple le code OLGA utilisé pour le dimensionnement des installations pétrolières. Nous allons présenter dans la suite les différentes équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie dans chacune des phases, ainsi que les équations de bilan aux interfaces. Une partie des développements suivants sont tirés de Fabre et Legendre (2000).

6.2.1 Equations de conservation pour un écoulement diphasique

Les lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie s'écrivent généralement sous forme d'équations aux dérivées partielles, en un point du fluide. Dans un écoulement diphasique, il existe des surfaces de discontinuité appelées interfaces séparant les deux phases. Ces interfaces ont une épaisseur de quelques molécules et sont le siège de brusques variations des différentes propriétés physiques (masse volumique, viscosité, ...). Aux interfaces, les équations de bilan s'écrivent sous forme de « relations de saut » (6.2). Le lecteur pourra trouver dans l'annexe du chapitre le détail de l'établissement des équations (6.1) et (6.2).

6.2.1.1 Equations de conservation de la masse

Pour les équations de conservation de la masse, on a $\phi_k = \rho_k$, $\phi_l = \Gamma_l = \Gamma_k = 0$. L'indice k est égal à l pour la phase liquide et à v pour la phase gazeuse :

– **pour la phase k** :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k) = 0 \quad (6.4)$$

– **pour l'interface** :

$$\sum_{k=l,v} [\rho_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i)] \cdot \mathbf{n}_{ik} = 0 \quad \dot{m}_l = \rho_l (\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_{il} = -\rho_v (\mathbf{u}_v - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_{iv} = -\dot{m}_v \quad (6.5)$$

où \dot{m}_l est le flux de masse sortant de la phase liquide à travers l'interface. \mathbf{u}_l est la vitesse locale de la phase liquide au niveau de l'interface et \mathbf{u}_i la vitesse de l'interface. Au niveau de l'interface, on a $\dot{m}_l + \dot{m}_v = 0$. Le flux de masse quittant une phase est égal au flux de masse rentrant dans l'autre phase. Lorsqu'il n'y a pas de transfert de masse d'une phase à l'autre, les trois vitesses sont égales au niveau de l'interface : $\mathbf{u}_l \cdot \mathbf{n}_{il} = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_{il} = \mathbf{u}_v \cdot \mathbf{n}_{iv}$.

6.2.1.2 Equations de conservation de la quantité de mouvement

On a $\phi_k = \rho_k \mathbf{u}_k$, $\phi_i = 0$, $\Gamma_k = -\Sigma_k = p_k \mathbf{I} - \boldsymbol{\tau}_k$, le tenseur des contraintes (pression et contraintes visqueuses) $\Gamma_i = \sigma \mathbf{I}$ la tension de surface, $\Pi_k = \rho_k \mathbf{g}$. Les équations de bilans de la quantité de mouvement s'écrivent :

– **pour la phase k** :

$$\frac{\partial \rho_k \mathbf{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) = \rho_k \mathbf{g} - \nabla p_k + \nabla \cdot (\Gamma_k) \quad (6.6)$$

On retrouve une équation similaire à celle que l'on aurait pour un écoulement monophasique.

– **pour l'interface** :

$$\begin{aligned} -\text{grad}_i(\sigma) + 2\kappa\sigma\mathbf{n}_{ik} &= \sum_{k=l,g} [\dot{m}_k \mathbf{u}_k + p_k \mathbf{n}_{ik} - \boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_{ik}] \\ &= \sum_{k=l,g} [\dot{m}_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + p_k \mathbf{n}_{ik} - \boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_{ik}] \end{aligned} \quad (6.7)$$

Cette dernière équation exprime une condition de raccordement de la quantité de mouvement à l'interface. On peut analyser les projections de cette équation selon la normale \mathbf{n}_{ik} et le long de l'interface :

– **en projection sur la normale** :

$$p_l - p_v = 2\kappa\sigma - \dot{m}_l (u_{ln} - u_{vn}) + (\tau_{ln} - \tau_{vn}) \quad (6.8)$$

où l'indice n indique la composante normale. Le saut de pression au niveau de l'interface est dû à la courbure de l'interface et à la tension de surface (pression capillaire), à la pression de recul créée par le transfert de masse au niveau de l'interface (2^e terme) et au saut des contraintes visqueuses normales. En absence d'écoulement et de transfert de masse, on retrouve l'équation de Young-Laplace :

$$p_l - p_v = 2\kappa\sigma \quad (6.9)$$

– *en projection sur la tangente :*

$$\text{grad}_t \sigma + \left[\dot{m}_l (u_{lt} - u_{vt}) - \tau_{lt} + \tau_{vt} \right] = 0 \quad (6.10)$$

La condition de non glissement à l'interface conduit à $u_{lt} = u_{vt}$ et :

$$\tau_{lt} - \tau_{vt} = \text{grad}_t \sigma \quad (6.11)$$

La non-uniformité de la tension interfaciale crée une discontinuité de la contrainte tangentielle au passage de l'interface. Pour une phase gazeuse $\tau_{vt} \approx 0$, un gradient de tension interfaciale va créer une contrainte de cisaillement τ_{lt} qui génère du mouvement dans la phase liquide : c'est l'effet Marangoni. Ce gradient de tension interfaciale peut être dû à la présence d'agents tensio-actifs au niveau de l'interface ou à un gradient de température.

6.2.1.3 Equations de conservation de l'énergie totale et de l'enthalpie totale

On a : $\phi_k = \rho_k \left(e_k + \frac{1}{2} u_k^2 \right)$. $\Gamma_k = \dot{q}_k - \Sigma_k \cdot \mathbf{u}_k$ où \dot{q}_k est le flux de chaleur cédé par la phase k , $\Gamma_i = \sigma \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}_i$, $\Pi_k = \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k + \rho_k r$ où r est un terme source dû au rayonnement. Les équations de l'énergie totale s'écrivent donc :

– *pour la phase k :*

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k \left(e_k + \frac{1}{2} u_k^2 \right) + \nabla \cdot \left[\rho_k \left(e_k + \frac{1}{2} u_k^2 \right) \mathbf{u}_k \right] = \rho_k (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k + r) + \nabla \cdot (\Sigma_k \cdot \mathbf{u}_k) - \nabla \cdot \dot{q}_k \quad (6.12)$$

Il est plus commode de travailler avec les équations de bilan de l'enthalpie totale $h_{tk} = e_k + \frac{1}{2} u_k^2 + \frac{p_k}{\rho_k}$. En introduisant cette nouvelle variable, l'équation (6.12) devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k h_{tk} + \nabla \cdot [\rho_k h_{tk} \mathbf{u}_k] = \rho_k (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k + r) + \nabla \cdot (\tau_k \cdot \mathbf{u}_k) - \nabla \cdot \dot{q}_k + \frac{\partial p_k}{\partial t} \quad (6.13)$$

L'enthalpie totale de la phase k varie suite à la puissance développée par les forces de volume, au rayonnement, à la dissipation visqueuse, au flux de chaleur échangé avec l'extérieur et à la

puissance développée par les forces de pression dans le cas d'ébullition explosive par exemple. La contribution de l'énergie cinétique du fluide dans l'enthalpie totale est généralement faible et l'enthalpie totale h_{ik} peut être prise égale à l'enthalpie du fluide h_k .

– *pour l'interface :*

On peut aussi écrire l'équation de l'énergie totale :

$$\nabla \cdot (\sigma \mathbf{u}_i) - 2\kappa \sigma \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_{ik} + \sum_{k=l,v} \left[\dot{m}_k \left(e_k + \frac{1}{2} u_k^2 \right) + (\dot{\mathbf{q}}_k - \boldsymbol{\Sigma}_k \cdot \mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{n}_{ik} \right] = 0 \quad (6.14)$$

Mais afin de pouvoir écrire le saut d'enthalpie à l'interface, il est plus aisé de travailler avec l'équation de l'énergie interne qui est obtenue en soustrayant l'équation (6.7) multipliée scalairement par la vitesse interfaciale \mathbf{u}_i à l'équation (6.14) :

$$\sigma \nabla_i \cdot (\mathbf{u}_i) + \sum_{k=l,v} \left[\dot{m}_k \left(e_k + \frac{p_k}{\rho_k} + \frac{1}{2} \frac{m_k^2}{\rho_k^2} - \frac{\mathbf{n}_{ik} \cdot \boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_{ik}}{\rho_k} \right) + \dot{\mathbf{q}}_k \cdot \mathbf{n}_{ik} \right] = 0 \quad (6.15)$$

En négligeant le travail dû à l'extension de l'interface, l'équation (6.15) devient :

$$\sum_{k=l,v} \left[\dot{m}_k \left(h_k + \frac{1}{2} \frac{m_k^2}{\rho_k^2} - \frac{\mathbf{n}_{ik} \cdot \boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_{ik}}{\rho_k} \right) + \dot{\mathbf{q}}_k \cdot \mathbf{n}_{ik} \right] = 0 \quad (6.16)$$

En négligeant le travail des forces visqueuses et de la pression de recul, l'équation (6.16) s'écrit simplement :

$$\dot{m}_l (h_v - h_l) = \dot{m}_l L_v = \dot{\mathbf{q}}_v \cdot \mathbf{n}_{iv} + \dot{\mathbf{q}}_l \cdot \mathbf{n}_{il} = (\dot{\mathbf{q}}_v - \dot{\mathbf{q}}_l) \cdot \mathbf{n}_{il} \quad (6.17)$$

Elle traduit le fait que le flux de chaleur apporté à l'interface par les phases liquide et vapeur sert au changement de phase, L_v étant l'enthalpie de changement de phase. Lorsqu'il y a vaporisation $L_v > 0$ (changement de phase liquide-vapeur), $(\dot{\mathbf{q}}_l - \dot{\mathbf{q}}_v) \cdot \mathbf{n}_{il} \approx \dot{\mathbf{q}}_l \cdot \mathbf{n}_{il} > 0$ et donc le flux de chaleur est apporté par la phase liquide.

Le système d'équations (6.4), (6.5), (6.6), (6.7), (6.13) et (6.16) constitue les équations locales phasiques instantanées. Leur résolution nécessite des moyens numériques importants puisqu'il s'agit de simulation numérique directe. Dans la plupart des problèmes, on n'a pas besoin de connaître la valeur locale instantanée des différentes variables de l'écoulement. On s'intéresse le plus souvent à la prédiction des grandeurs moyennes de l'écoulement qui peuvent être directement comparées à l'expérience : pertes de pression dans un écoulement à bulles, débit massique de vapeur dans un évaporateur, etc. Les équations de bilan sont donc généralement moyennées. Il existe plusieurs types de prises de moyennes (Ishii, 1975, Delhay, 1981) : moyennes temporelles, statistiques, spatiales et combinaisons de ces différentes prises de moyennes (temporelle/spatiale). Dans la suite nous présenterons les équations de bilan locales intégrées temporellement (équations phasiques locales moyennes), puis intégrées dans la section de la conduite (équations phasiques filaires).

6.2.2 Equations phasiques locales moyennées

6.2.2.1 Opérateurs de moyennes et de dérivation

La moyenne statistique définie sur N réalisations ϕ_j de la grandeur ϕ s'écrit :

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \lim_{N \longrightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \phi_j(\mathbf{x}, t) \right) \quad (6.18)$$

Lorsque l'écoulement est stationnaire, on préfère utiliser une moyenne temporelle :

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{T} \int_T \phi dt \right) \quad (6.19)$$

Ces opérateurs vérifient les conditions de Reynolds : linéarité, idempotence, commutativité vis-à-vis des opérateurs de dérivation :

$$\overline{a + b\phi} = a + b\bar{\phi} \quad \text{avec } a \text{ et } b \text{ constants}$$

$$\overline{\phi\bar{\phi}} = \bar{\phi}\bar{\phi} \quad (6.20)$$

$$\overline{\frac{\partial \phi}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} \quad \text{et} \quad \overline{\nabla \phi} = \nabla \bar{\phi}$$

Lorsque l'écoulement est stationnaire, on peut appliquer l'hypothèse d'ergodicité et les moyennes statistiques et temporelles sont équivalentes. Toute grandeur instantanée peut être transformée en grandeur moyenne et grandeur fluctuante : $\phi = \bar{\phi} + \phi'$.

On définit également la fonction indicatrice de phase qui permet à chaque instant t et en chaque point x de savoir dans quelle phase on se trouve :

$$\begin{aligned} \chi_k(\mathbf{x}, t) &= 1 & \text{si } \mathbf{x} \in k \\ \chi_k(\mathbf{x}, t) &= 0 & \text{si } \mathbf{x} \notin k \end{aligned} \quad (6.21)$$

On a $\chi_v + \chi_l = 1$ presque partout sauf à des instants très courts correspondant au passage de l'interface. On peut étendre cette équation à tout le domaine à chaque instant en écrivant :

$$\chi_v + \chi_l + \delta_i = 1 \quad (6.22)$$

où δ_i est la densité de Dirac sur l'interface, $\delta_i=1$ si l'interface est présente au point considéré à l'instant t . On définit également le taux de présence de la phase k : $\alpha_k = \overline{\chi_k}$ qui est la moyenne temporelle de la fonction indicatrice de phase. On définit finalement la moyenne eulérienne phasique d'une grandeur physique ϕ_k :

$$\overline{\phi_k} = \frac{\overline{\chi_k \phi_k}}{\alpha_k} \quad \overline{\chi_k \phi_k'} = 0 \quad (6.23)$$

et la moyenne interfaciale :

$$\overline{\phi}^i = \frac{\overline{\delta_i \phi}}{\alpha_i} \quad \overline{\delta_i} = \alpha_i \quad (6.24)$$

La grandeur $\varphi = \chi_l \varphi_l + \chi_v \varphi_v + \varphi_i \delta_i$ est définie partout dans l'espace, mais elle n'est pas forcément continue, différentiable partout, c'est une distribution. Il en est de même pour la grandeur χ_k . On peut cependant calculer les dérivées spatiales et temporelles de cette dernière au sens des distributions. Si on note V_k le volume de la phase k , on peut écrire que la variation temporelle du volume V_k est due au déplacement de l'interface avec la vitesse \mathbf{u}_i :

$$\frac{\partial V_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \chi_k dV = \int_V \frac{\partial \chi_k}{\partial t} dV = \int_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_{ik} \delta_i dV \quad (6.25)$$

par conséquent :

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} = u_i \cdot n_{ik} \delta_i \quad (6.26)$$

Si on note $\frac{\delta}{\delta t}$ la dérivation prise en suivant l'interface dans son mouvement à la vitesse \mathbf{u}_i :

$$\frac{\delta \chi_k}{\delta t} = \frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \mathbf{u}_i \cdot \nabla \chi_k = 0 \quad (6.27)$$

Lorsque l'on se déplace à la vitesse \mathbf{u}_i , on reste dans la phase k , par conséquent :

$$\begin{aligned} \nabla \chi_k &= -\delta_i \mathbf{n}_{ik} \\ \frac{d\chi_k}{dt} &= \frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \mathbf{u}_k \cdot \nabla \chi_k = (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla \chi_k \end{aligned} \quad (6.28)$$

Lorsqu'il y a transfert interfacial de masse, la différence des vitesses $(\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) \neq 0$, représente la vitesse relative d'une particule de la phase k par rapport à l'interface.

6.2.2.2 Equations phasiques moyennes

Pour obtenir l'équation phasique moyennée de la phase k , on multiplie l'équation (6.1) par χ_k et on prend la moyenne temporelle de chacun des termes. Le terme de gauche de l'équation devient après utilisation des équations (6.26) et (6.28) :

$$\begin{aligned} \chi_k \left(\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \mathbf{u}_k) \right) &= \frac{\partial \chi_k \phi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \chi_k \mathbf{u}_k) - \phi_k \frac{\partial \chi_k}{\partial t} - \phi_k \mathbf{u}_k \cdot \nabla (\chi_k) \\ &= \frac{\partial \alpha_k \phi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \phi_k \mathbf{u}_k) - \phi_k \mathbf{u}_i \mathbf{n}_{ik} \alpha_i + \phi_k \mathbf{u}_k \mathbf{n}_{ik} \alpha_i \end{aligned} \quad (6.29)$$

On procède de même avec le terme de droite de l'équation (6.1) pour obtenir finalement l'équation phasique moyennée de la phase k :

$$\frac{\partial \alpha_k \phi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \phi_k \mathbf{u}_k + \alpha_k \Gamma_k) - \alpha_k \Pi_k + \alpha_i [\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \Gamma_k] \cdot \mathbf{n}_{ik} = 0 \quad (6.30)$$

Le dernier terme de l'équation (6.30) traduit les échanges moyens entre les deux phases au niveau de l'interface. De la même manière, on peut obtenir l'équation phasique moyenne au niveau de l'interface en appliquant une moyenne temporelle à l'équation (6.2) multipliée par δ_t :

$$\alpha_i \left[\nabla_i \cdot (\Gamma_i) - 2\kappa \Gamma_i \mathbf{n}_{ik} \right] + \alpha_i \sum_{k=l,v} [\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \Gamma_k] \cdot \mathbf{n}_{ik} = 0 \quad (6.31)$$

On détaille par la suite la forme prise par les équations de bilan de la masse, de la quantité de mouvement et de l'enthalpie.

Equation de conservation de la masse

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k) = -\alpha_i [\rho_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i)] \cdot \mathbf{n}_{ik} = -\alpha_i \dot{m}_k \quad (6.32)$$

Condition de raccordement à l'interface :

$$\sum_{k=l,v} [\rho_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i)] \cdot \mathbf{n}_{ik} = \sum_{k=l,v} \dot{m}_k = 0 \quad (6.33)$$

Equations de bilan de la quantité de mouvement

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) - \alpha_k \rho_k \mathbf{g} + \nabla \cdot (\alpha_k p_k) - \nabla \cdot (\alpha_k \boldsymbol{\tau}_k) \\ = -\alpha_i [\rho_k \mathbf{u}_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_{ik} + p_k \mathbf{n}_{ik} - \boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_{ik}] = -\alpha_i \dot{m}_k \mathbf{u}_{ki} + \alpha_i \mathbf{I}_k \end{aligned} \quad (6.34)$$

où \mathbf{u}_{ki} est la vitesse moyenne de la phase k au voisinage de l'interface et $\mathbf{I}_k = \left[-\overline{p_k \mathbf{n}_{ik}} + \overline{\boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_{ik}} \right]$

le transfert interfacial de quantité de mouvement. Le tenseur des contraintes de cisaillement inclut les contraintes visqueuses et également les contraintes de Reynolds qui peuvent être exprimées à l'aide d'un modèle de turbulence approprié.

L'équation de raccordement à l'interface s'écrit :

$$\alpha_i \left[\overline{\nabla_i \sigma} - 2\kappa \sigma \mathbf{n}_{ik} \right] = \alpha_i \left[\sum_{k=l,v} \left(\mathbf{I}_k - \dot{m}_k \mathbf{u}_{ki} \right) \right] \quad (6.35)$$

Equations de conservation de l'enthalpie

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \rho_k \overline{h_{tk}}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha_k \rho_k \overline{h_{tk} \mathbf{u}_k} \right) &= \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\mathbf{u}_k \boldsymbol{\tau}_k} \right) - \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\dot{\mathbf{q}}_k} \right) + \alpha_k \left(\rho_k \overline{r} + \rho_k \overline{\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k} \right) \\ &+ \frac{\partial \alpha_k p_k}{\partial t} - \alpha_i \left[\overline{\dot{m}_k h_{tk}} + \left(p_k \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k \cdot \boldsymbol{\tau}_k + \dot{\mathbf{q}}_k \right) \cdot \mathbf{n}_{ik} \right] \end{aligned} \quad (6.36)$$

L'équation de raccordement à l'interface s'écrit :

$$\sum_{k=l,v} \alpha_i \left[\overline{\dot{m}_k \left(h_k + \frac{1}{2} \frac{\dot{m}_k^2}{\rho_k^2} - \frac{\mathbf{n}_{ik} \cdot \boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_{ik}}{\rho_k} \right) + \dot{\mathbf{q}}_k \cdot \mathbf{n}_{ik}} \right] \quad (6.37)$$

6.2.2.3 Résolution du système d'équations : lois de fermetures

Nous disposons d'un système de 16 équations scalaires à résoudre :

- 3 équations de conservation de la masse : $2 \times \text{éq.}(6.32) + \text{éq.}(6.33)$;
- 3 équations vectorielles (9 scalaires) de quantité de mouvement : $2 \times \text{éq.}(6.34) + \text{éq.}(6.35)$;
- 3 équations de conservation de l'enthalpie : $2 \times \text{éq.}(6.36) + \text{éq.}(6.37)$;
- 1 équation topologique : $\alpha_l + \alpha_v = 1$.

Le nombre d'inconnues principales du problème est de 21 :

$$\alpha_l, \alpha_v, \alpha_i, \overline{\dot{m}_l}, \overline{\dot{m}_v}, \overline{\mathbf{u}_l(3)}, \overline{\mathbf{u}_v(3)}, \overline{p_l}, \overline{p_v}, \overline{\mathbf{I}_l(3)}, \overline{\mathbf{I}_v(3)}, \overline{h_l}, \overline{h_v}$$

On ne considère pas comme inconnues les contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}_k$ (incluant les contraintes de Reynolds) dans les deux phases, qui sont modélisées par ailleurs par un modèle de turbulence approprié. De même le flux de chaleur $\dot{\mathbf{q}}_k$ dans les deux phases est exprimé par une loi de Fourier incluant également la diffusivité turbulente.

La prise de moyenne temporelle occasionne une perte d'information qui se traduit par un nombre supérieur d'inconnues par rapport au nombre d'équations. Il est donc nécessaire d'introduire des lois de fermeture (6.5) pour résoudre le système. Généralement on modélise le transfert interfacial de quantité de mouvement $\overline{\mathbf{I}_l}$ ou $\overline{\mathbf{I}_v}$ et on fait l'hypothèse d'égalité des pressions moyennes dans les deux

phases $\overline{p_l} = \overline{p_v}$. Cette dernière hypothèse n'est cependant pas envisageable lorsque les effets capillaires sont importants (microfluidique). Dans ce cas, on se donne une expression de la courbure moyenne de l'interface κ pour déduire la relation entre les deux pressions moyennes à partir de l'équation (6.35). Il est nécessaire également de se donner une loi de fermeture pour α_i l'aire interfaciale par unité de volume. Généralement on écrit une équation de transport de α_i (Kocamustafaogullari et Ishii, 1983 ; Morel *et al*, 1999). En écoulements à bulles, cette équation permet notamment de calculer la taille moyenne des bulles résultant des phénomènes de rupture, coalescence, nucléation et croissance, condensation et effondrement (Yao et Morel, 2004).

6.2.3 Equations phasiques filaires

Pour un certain nombre d'applications, une description des grandeurs moyennées temporellement et spatialement dans la section de la conduite est suffisante. Il faut cependant que l'écoulement ait une direction privilégiée selon l'axe z de la conduite. La réduction de la complexité des modèles 3-D consiste à effectuer des moyennes des différentes grandeurs dans la section de la conduite A .

6.2.3.1 Définitions

On considèrera par la suite que le tube a une section constante A de normale \mathbf{n}_z dans la direction de l'écoulement et limitée par un contour C (Fig. 6.1). La normale au contour est notée \mathbf{n}_c de sorte que $\mathbf{n}_c \cdot \mathbf{n}_z = 0$.

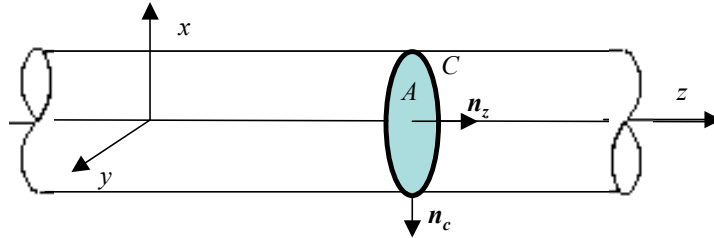


Fig. 6.1 – Système de coordonnées utilisé.

On définit la fraction surfacique moyenne ou le taux de présence moyen de la phase k dans la section A :

$$R_k = \frac{1}{A} \int_A \alpha_k dA \quad (6.38)$$

La vitesse moyenne dans une section en projection sur l'axe de la conduite est notée $\overline{u_{kz}}$ ou pour simplifier la notation u_k . On a :

$$R_k \mathbf{u}_k = \frac{1}{A} \int_A \alpha_k \overline{\mathbf{u}_k} \cdot \mathbf{n}_z dA \quad (6.39)$$

La vitesse débitante ou vitesse superficielle de la phase k est définie par :

$$j_k = R_k u_k = \frac{\dot{m}_k}{A} = \frac{\dot{M} x_k}{\rho_k} \quad (6.40)$$

C'est le débit de la phase k divisé par la section A de la conduite. Elle peut aussi s'exprimer en fonction du flux de masse total \dot{M} , du titre de la phase x_k , grandeurs plus communément utilisées pour les écoulements liquide-vapeur.

La moyenne dans une section de la grandeur ϕ s'écrit :

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{A} \int_A \phi dA \quad (6.41)$$

Cet opérateur de moyenne étant linéaire, il commute avec l'opérateur de moyenne temporelle ou statistique : $\langle \overline{\phi} \rangle = \overline{\langle \phi \rangle}$. On définit également la moyenne dans la section d'une grandeur phasique :

$$R_k \phi_k = \left\langle \alpha_k \overline{\phi_k} \right\rangle = \frac{1}{A} \int_A \alpha_k \overline{\phi_k} dA. \quad (6.42)$$

6.2.3.2 Equations intégrées dans la section de la conduite

Les équations diphasiques intégrées dans la section de la conduite sont présentées dans différents ouvrages, notamment celui de Wallis (1969). L'équation de conservation de la grandeur ϕ_k est obtenue en appliquant l'opérateur de moyenne $\langle \cdot \rangle$ à l'équation (6.30) :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{A} \int \left\{ \frac{\partial \alpha_k \overline{\phi_k}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\phi_k} \mathbf{u}_k + \alpha_k \overline{\Gamma_k} \right) \right\} dA \\ & + \frac{1}{A} \int \left\{ -\alpha_k \overline{\Pi_k} + \alpha_i \left[\overline{\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \Gamma_k} \right] \cdot \mathbf{n}_{ik} \right\} dA = 0 \end{aligned} \quad (6.43)$$

On rappelle que l'opérateur de moyenne $\langle \cdot \rangle$ est commutatif par rapport aux opérateurs de dérivation temporelle et spatiale et que pour un vecteur \mathbf{v} on a :

$$\begin{aligned} \int_A \nabla \cdot \mathbf{u} dA &= \int_A \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) dA \\ &= \frac{\partial}{\partial z} \int_A u_z dA + \int_A \nabla \cdot \mathbf{u} dA = \frac{\partial}{\partial z} \int_A u_z dA + \int_C \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_C dC \end{aligned} \quad (6.44)$$

Après intégration, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \alpha_k \overline{\phi_k} \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\langle \alpha_k \overline{\phi_k u_{kz}} + \alpha_k \overline{\Gamma_{kz}} \rangle \right) + \frac{I}{A} \int_C \left(\alpha_k \overline{\phi_k u_k} + \alpha_k \overline{\Gamma_k} \right) \cdot \mathbf{n}_C dC \\ - R_k \Pi_k + \frac{I}{A} \left\{ \int_A \alpha_i \overline{[\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \Gamma_k] \cdot \mathbf{n}_{ik}}^i \right\} dA = 0 \end{aligned} \quad (6.45)$$

Sachant que la vitesse \mathbf{u}_k est nulle sur le contour C et en utilisant l'équation (6.44), on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_k \phi_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\langle \alpha_k \overline{\phi_k u_{kz}} + R_k \overline{\Gamma_{kz}} \rangle \right) + \frac{I}{A} \int_C \left(\alpha_k \overline{\Gamma_k} \right) \cdot \mathbf{n}_C dC - R_k \Pi_k \\ \frac{I}{A} \left\{ \int_A \alpha_i \overline{[\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \Gamma_k] \cdot \mathbf{n}_{ik}}^i \right\} dA = 0 \end{aligned} \quad (6.46)$$

Equations de conservation de la masse

On considère que la masse volumique de la phase k est constante dans la section A de sorte que :

$$\langle \alpha_k \overline{\rho_k u_{kz}} \rangle = \rho_k \langle \alpha_k \overline{u_{kz}} \rangle = \rho_k R_k u_k :$$

$$\frac{dR_k \rho_k}{dt} + \frac{\partial}{\partial z} (R_k \rho_k u_k) = -\dot{M}_k \quad \text{avec} \quad \dot{M}_k = \frac{1}{A} \int_A \alpha_i \overline{[\rho_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i)] \cdot \mathbf{n}_{ik}}^i dA \quad (6.47)$$

avec à l'interface $\dot{M}_l + \dot{M}_v = 0$. \dot{M}_k représente le débit massique moyen dans la section par unité de volume transféré de la phase k vers l'autre phase.

Equations de bilan de la quantité de mouvement en projection selon l'axe de la conduite

On obtient cette équation en multipliant scalairement l'équation (6.41) par \mathbf{n}_z et en intégrant sur la section de la conduite :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_k R_k u_{kz}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_k \langle \alpha_k \overline{u_{kz}^2} \rangle \right) + \frac{\partial R_k P_k}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\alpha_k \overline{(\boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_z)} \cdot \mathbf{n}_z \right) \\ + \frac{1}{A} \int_C \left(\alpha_k \overline{p_k} \right) \cdot \mathbf{n}_C \cdot \mathbf{n}_z dC - \frac{1}{A} \int_C \left(\alpha_k \overline{\boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{n}_z} \right) \cdot \mathbf{n}_C dC \\ + \rho_k R_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}_z + \frac{1}{A} \int_A \alpha_i \overline{\dot{m}_k u_{kz}}^i dA + \frac{1}{A} \int_A \alpha_i \overline{[\mathbf{I}_k] \cdot \mathbf{n}_z}^i dA = 0 \end{aligned} \quad (6.48)$$

On peut remarquer qu'au niveau du second terme $\langle \alpha_k \overline{u_{kz}^2} \rangle \neq R_k u_k^2$ car la moyenne d'un carré est toujours supérieure ou égale au carré des moyennes. Si on considère un taux de vide uniforme dans la section du tube et un écoulement laminaire avec un profil de vitesse parabolique, on peut montrer que le rapport entre les deux valeurs vaut 4/3. Pour un écoulement turbulent avec un profil de vitesse en puissance 1/7 ($Re = 10^5$), on montre que le rapport entre les deux grandeurs est de 1,02, ce qui permet de les confondre. C'est ce qui sera fait par la suite, en gardant bien à l'esprit qu'il s'agit d'une

approximation. Le 4^e terme de l'équation (6.48) correspond au gradient axial des contraintes visqueuses ou turbulentes dans la direction de l'écoulement. Ce terme est généralement négligeable par rapport au gradient de pression. Le 5^e terme est nul car $\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_c = 0$. Le 6^e terme est le frottement visqueux s'exerçant sur la paroi mouillée du tube par la phase k où S_{pk} est le périmètre du tube en contact avec la phase k (le long duquel $\alpha_k = 1$) :

$$-\frac{1}{A} \int_C \left(\alpha_k \overline{\boldsymbol{\tau}_k} \cdot \mathbf{n}_k \right) \cdot \mathbf{n}_c dC = -\frac{\tau_{pk} S_{pk}}{A} \quad (6.49)$$

Le 7^e terme s'écrit sous la forme : $\dot{M}_k u_{ki}$ avec u_{ki} la vitesse moyenne de la phase k au niveau de l'interface dans la direction de l'écoulement.

Le dernier terme de l'équation peut s'exprimer en faisant apparaître la valeur moyenne de la pression au niveau de l'interface : $\overline{p_k} = p_i + p'_{ki}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{A} \int_A \left(\alpha_k \overline{\mathbf{I}_k} \cdot \mathbf{n}_z \right) dA &= \frac{1}{A} \int_A \left[\alpha_i \overline{\left(-p_k \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_k \right) \cdot \mathbf{n}_{ik} \cdot \mathbf{n}_z} \right] dA \\ &= \frac{1}{A} \int_A \left[\alpha_i \overline{\left(-p'_{ki} \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_k \right) \cdot \mathbf{n}_{ik} \cdot \mathbf{n}_z} \right] dA - \frac{p_i}{A} \int_A \left(\alpha_i \overline{\mathbf{n}_{ik} \cdot \mathbf{n}_z} \right) dA \\ &= \frac{\tau_{ik} S_i}{A} - p_i \nabla R_k \cdot \mathbf{n}_z = \frac{\tau_{ik} S_i}{A} - p_i \frac{\partial R_k}{\partial z} \end{aligned} \quad (6.50)$$

où τ_{ik} est le frottement interfacial et S_i le périmètre interfacial (moyenne de α_i sur la section du tube). L'équation (6.48) devient donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_k R_k u_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_k R_k u_k^2) + R_k \frac{\partial p_k}{\partial z} - \frac{\tau_{pk} S_{pk}}{A} \\ + \rho_k R_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}_z + (p_k - p_i) \frac{\partial R_k}{\partial z} + \dot{M}_k u_{ki} + \frac{\tau_{ik} S_i}{A} = 0 \end{aligned} \quad (6.51)$$

Pour un modèle à une pression, le 6^e terme de l'équation est égal à 0.

Le bilan interfacial de quantité de mouvement s'écrit :

$$\sum_{i=l,v} \frac{\tau_{ik} S_i}{A} + \dot{M}_k u_{ki} = 0 \quad (6.52)$$

La vitesse moyenne de la phase k au niveau de l'interface u_{ki} est proche de la vitesse interfaciale u_i , de sorte que l'équation (6.52) peut s'écrire : $\tau_{il} + \tau_{iv} = 0$.

Equations de conservation l'enthalpie

De la même manière l'équation de conservation de l'enthalpie de la phase k s'écrit :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \rho_k R_k h_{ik}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k R_k h_{ik} u_k}{\partial z} - \frac{\partial \langle \alpha_k \boldsymbol{\tau}_k \cdot \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_z \rangle}{\partial z} - \frac{1}{A} \int_C (\alpha_k \overline{\boldsymbol{\tau}_k} \cdot \mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{n}_c dC \\
 & + \frac{\partial R_k \dot{q}_{kz}}{\partial z} + \frac{\dot{q}_{kz} S_{pk}}{A} - R_k \left(\rho_k \langle \overline{r} \rangle + \rho_k u_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}_z \right) - \frac{\partial R_k P_k}{\partial t} \\
 & + \frac{1}{A} \int_A \overline{\alpha_i [\dot{m}_k h_{ik} + (p_k \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k \cdot \boldsymbol{\tau}_k + \dot{q}_k) \cdot \mathbf{n}_{ik}]}^i dA = 0
 \end{aligned} \tag{6.53}$$

Les 3^e, 4^e (puissance dissipée par les contraintes visqueuses) et 5^e (diffusion axiale de chaleur) termes sont négligeables devant les autres termes. Il en est de même pour la puissance des forces de gravité. En négligeant la puissance dissipée par la pression de recul et les forces interfaciales, le dernier terme de l'équation s'écrit :

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{A} \int_A \overline{\alpha_i [\dot{m}_k h_{ik} + (p_k \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k \cdot \boldsymbol{\tau}_k + \dot{q}_k) \cdot \mathbf{n}_{ik}]}^i dA = \dot{M}_k h_{ik} + \frac{\dot{q}_{ik} S_i}{A} \\
 & + \frac{1}{A} \int_A \overline{p_k \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_{ik} \delta_i} dA = \dot{M}_k h_{ik} + \frac{\dot{q}_{ik} S_i}{A} + p_i \frac{\partial R_k}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{6.54}$$

où h_{ik} est l'enthalpie moyenne de la phase k à l'interface et \dot{q}_{ik} le flux de chaleur cédé par la phase k à l'interface. L'équation (6.53) s'écrit finalement :

$$\frac{\partial \rho_k R_k h_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k R_k h_k u_k}{\partial z} + \frac{\dot{q}_{pk} S_{pk}}{A} - R_k \rho_k \langle \overline{r} \rangle + R_k \frac{\partial p_k}{\partial t} + \dot{M}_k h_{ik} + \frac{\dot{q}_{ik} S_i}{A} = 0 \tag{6.55}$$

ou plus simplement en absence de rayonnement et de brusques variations de pression :

$$\frac{\partial \rho_k R_k h_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k R_k h_k u_k}{\partial z} = - \frac{\dot{q}_{pk} S_{pk}}{A} - \dot{M}_k h_{ik} - \frac{\dot{q}_{ik} S_i}{A} \tag{6.56}$$

Les flux de chaleur sont comptés positivement lorsqu'ils sont dirigés vers l'extérieur de la phase k . Lorsque la paroi du tube est chauffée par l'extérieur $q_p < 0$. Le bilan d'enthalpie moyen à l'interface s'écrit :

$$\dot{M}_l (h_{il} - h_{iv}) + \frac{\dot{q}_{il} - \dot{q}_{iv}}{A} = 0 \tag{6.57}$$

6.2.3.3 Résolution du système d'équations : lois de fermetures

Après avoir utilisé les bilans interfaciaux pour réduire le nombre d'inconnues du problème, il reste 6 équations de bilan : 2 équations pour la conservation de masse, 2 pour la quantité de mouvement, 2 pour l'enthalpie. Les inconnues du problème sont les 6 variables principales : $R_v, u_l, u_v, p, h_l, h_v$ et 9 variables secondaires : $\dot{M}_l, S_{pl}, S_l, \tau_{pl}, \tau_p, \tau_{iv}, \dot{q}_{pl}, \dot{q}_{pv}, \dot{q}_{il}$. Ici aussi, on peut utiliser une équation de transport de l'aire interfaciale intégrée dans l'équation de la conduite, ce qui permet de calculer le terme S_i (Hibiki, 2003).

Dans le système d'équations, les vitesses u_k peuvent être exprimées en fonction du flux total de masse \dot{M} et du titre massique x_k de la phase k avec $R_k u_k = \dot{M} x_k / \rho_k$. Les variables principales du problème sont alors : $R_v, x_v, \dot{M}, p, h_l, h_v$.

Pour résoudre un tel système il faut proposer des lois de fermeture pour les neuf variables secondaires. Ces lois de fermeture dépendent fortement de la configuration de l'écoulement rencontré (voir § 2.4). On peut noter que dans un certain nombre de cas, il n'est pas nécessaire de résoudre le système complet à six équations et on peut plus simplement utiliser les équations de conservation du mélange (somme des équations de conservation des deux phases), ce qui permet de faire disparaître les termes interfaciaux. Les équations pour le mélange sont associées à des relations phénoménologiques liant les variables des deux phases, comme une vitesse de glissement ou un écart à l'équilibre thermique des phases qui sont exprimées en fonction de variables locales du système : pression, flux de masse, etc. On peut par exemple utiliser une ou deux équations de mélange selon que les vitesses des phases ou les températures des phases peuvent être supposées égales. Ainsi le nombre de degrés de liberté du système diminue.

Par exemple lorsque l'enthalpie d'une des deux phases est connue, on n'utilise qu'une seule équation de conservation de l'enthalpie pour le mélange et on définit un flux de chaleur global au niveau de la paroi du tube :

$$\frac{\partial \rho_l R_l h_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l R_l h_l u_l}{\partial z} + \frac{\partial \rho_v R_v h_v}{\partial t} + \frac{\partial \rho_v R_v h_v u_v}{\partial z} = -\frac{\dot{q}_{pl} S_{pl}}{A} - \frac{\dot{q}_{pv} S_{pv}}{A} = -\frac{\dot{q}_p S_p}{A} \quad (6.58)$$

Si les deux phases sont à saturation, on peut réécrire plus simplement cette équation pour un écoulement stationnaire en utilisant le flux total de masse \dot{M} , le titre massique de vapeur x et les enthalpies des deux phases à saturation :

$$h_{l,sat} \frac{\partial \rho_l R_l u_l}{\partial z} + h_{v,sat} \frac{\partial \rho_v R_v u_v}{\partial z} = \dot{M} L_v \frac{\partial x}{\partial z} = -\frac{\dot{q}_p S_p}{A} \quad (6.59)$$

Cette équation permet de calculer l'évolution du titre massique dans l'écoulement en fonction du flux de chaleur pariétal.

Autre exemple : pour certaines configurations d'écoulement, les vitesses moyennes des deux phases sont liées par une relation phénoménologique. Dans ce cas, on peut remplacer les 2 équations de bilan de la quantité de mouvement par une équation phénoménologique $f(u_l, u_v) = 0$ et une équation de bilan de la quantité de mouvement pour le mélange :

$$\frac{\partial (\rho_l R_l u_l + \rho_v R_v u_v)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_l R_l u_l^2 + \rho_v R_v u_v^2)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\tau_p S_p}{A} + (\rho_l R_l + \rho_v R_v) \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}_z = 0 \quad (6.60)$$

On peut ainsi s'affranchir de la modélisation des termes interfaciaux. Il suffit de se donner une loi de fermeture pour le frottement pariétal. Quelques exemples de lois de fermetures sur le frottement pariétal seront donnés dans la partie suivante ; les lois concernant les flux de chaleur pariétal et interfacial en régime d'ébullition ou de condensation seront données dans les chapitres correspondants.

6.2.4 Régimes d'écoulements et lois de fermeture

On donne dans cette partie quelques lois de fermeture sur l'hydrodynamique des écoulements diphasiques. Au préalable, il convient de définir les différentes configurations de l'écoulement dont vont dépendre ces lois de fermeture.

6.2.4.1 Cartes de configuration d'écoulement

Les configurations observées dépendent des débits de liquide et de gaz \dot{M}_l et \dot{M}_v injectés dans la conduite ou le canal, des propriétés physiques des fluides et de la gravité. Les différents régimes d'écoulement observés sont fréquemment portés sur des cartes de configuration d'écoulement en fonction des vitesses superficielles du liquide j_l et du gaz ou de la vapeur j_v , c'est-à-dire le débit de la phase divisé par la section du tube. Sur les Fig. 6.2 et Fig. 6.3 sont représentées les cartes de configuration d'écoulements Taitel *et al.* (1980) et Taitel et Dukler (1976) pour des écoulements eau-air en tube de 5 cm de diamètre en configuration verticale et horizontale.

Les configurations d'écoulements observées sont les suivantes : à forte vitesse de liquide et vitesse de gaz modérée, on est présence d'un *écoulement à bulles* : la phase gazeuse est dispersée au sein d'une phase liquide continue. Les bulles de gaz sont généralement calibrées par la turbulence de la phase liquide. En écoulement vertical à plus faible vitesse de liquide, on observe des bulles de plus grosse taille, celle-ci étant contrôlée par un équilibre entre rupture et coalescence des bulles. Lorsque les tubes sont de petits diamètres (de l'ordre du mm), la taille minimale des bulles est voisine de celle du tube.

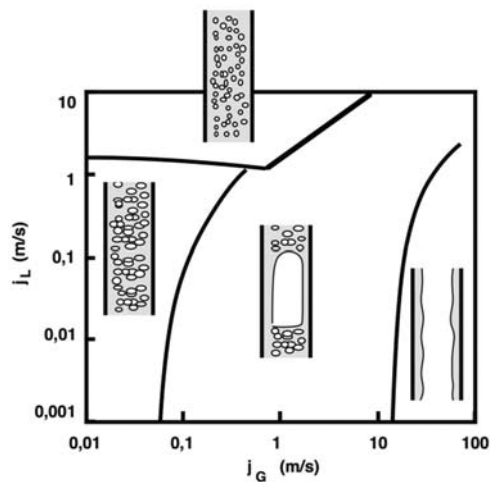


Fig. 6.2 – Carte de configuration d'écoulement eau-air vertical en tube de 5 cm de Taitel (1980) d'après (Fabre et Legendre, 2000).

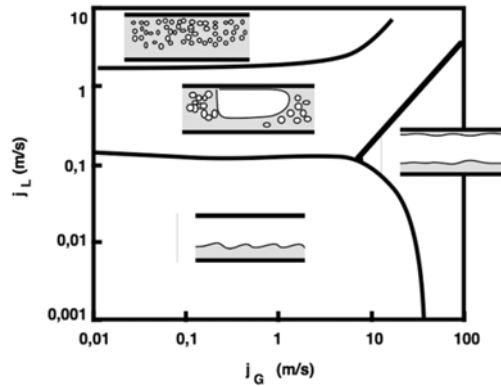


Fig. 6.3 – Carte de configuration d'écoulement eau-air horizontal en tube de 5 cm de Taitel (1976) d'après (Fabre et Legendre, 2000).

Lorsque le débit de gaz augmente, on trouve une configuration d'écoulement à poches et bouchons ou écoulement intermittent ou « Slug flow » en anglais. L'écoulement fait apparaître une succession quasi-périodique de longues bulles de gaz, séparées par des bouchons de liquide qui peuvent être aérés par de petites bulles. Ce régime d'écoulement est présent en configuration verticale et également de manière importante en configuration horizontale où il présente une légère dissymétrie due aux forces de gravité.

A forte vitesse de gaz, on trouve le régime d'écoulement annulaire, caractérisé par un film de liquide à la paroi fortement cisaillé par un écoulement gazeux au cœur de la conduite. L'interface gaz-liquide peut être déstabilisée et des gouttelettes de liquide arrachées et transportées dans le cœur gazeux.

En écoulement horizontal, à faible vitesse de liquide, l'écoulement est stratifié par les forces de gravité. A mesure que les forces d'inertie deviennent importantes, le film liquide remonte le long de la paroi du tube et cet écoulement transite vers un écoulement annulaire ou un écoulement intermittent.

Ces cartes de configurations ont été établies en écoulement adiabatique. En écoulement avec ébullition et condensation, le changement de phase peut conduire à certaines déviations. Mais de manière générale, les cartes de configuration en écoulement adiabatique permettent de prédire raisonnablement les configurations des écoulements bouillants pour des flux thermiques faibles et modérés. Par contre ces cartes ne permettent pas la prédiction des régimes d'écoulements à l'aval de la crise d'ébullition ou de l'assèchement de la paroi (post CHF). En ébullition convective à fort flux de chaleur, au-dessus du flux critique, on observe un régime d'écoulement annulaire inverse où la vapeur est en contact avec la paroi et le liquide est sous la forme d'un noyau au centre du tube.

Pour les régimes d'écoulements à bulles ou à poches et bouchons, la vitesse moyenne de la phase gazeuse u_g peut s'exprimer en fonction de la vitesse moyenne du liquide u_l (modèle homogène ou modèle à flux de dérive). On pourra donc utiliser une équation de quantité de mouvement du mélange pour décrire la dynamique de l'écoulement. Pour les régimes annulaires et stratifiés en revanche, la dynamique de l'écoulement est contrôlée par les transferts de quantité de mouvement entre les deux phases. Il n'est donc pas envisageable d'utiliser une équation de quantité de mouvement pour le mélange et il faudra utiliser un modèle à deux fluides incluant des lois de fermeture pour les frottements pariétal et interfacial. Nous allons détailler quelques modèles dans les paragraphes suivants.

6.2.4.2 Modèle homogène

Ce modèle peut être appliqué lorsque les vitesses du liquide et du gaz peuvent être considérées comme égales $u_l = u_v$. L'écoulement diphasique se comporte alors comme un écoulement monophasique ayant les propriétés du mélange (masse volumique, viscosité). L'équation de quantité de mouvement du mélange s'écrit dans ce cas :

$$\frac{\partial \rho_m u_m}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_m u_m^2)}{\partial z} = \frac{\partial \dot{m}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\dot{m}^2}{\rho_m} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\tau_p S_p}{A} + \rho_m \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}_z = 0 \quad (6.61)$$

$$\text{avec : } \rho_m = R_l \rho_l + R_v \rho_v \quad \text{et} \quad u_m = u_v = u_l = j_v + j_l = \frac{\dot{m}}{\rho_m}$$

L'égalité des vitesses moyennes des deux phases donne directement la valeur du taux de vide moyen R_v en fonction du titre x :

$$R_v = \frac{j_v}{j_v + j_l} = \frac{x}{x + (1-x)\rho_v/\rho_l} \quad (6.62)$$

Afin de calculer le gradient de pression dans l'écoulement, il faut se donner une loi de fermeture pour le frottement pariétal. Celui-ci est modélisé comme en écoulement monophasique en fonction de la corrélation de Poiseuille pour un écoulement laminaire ou celle de Blasius pour un écoulement turbulent :

$$\frac{\tau_p S_p}{A} = \frac{4\tau_p}{D} = -\frac{2}{D} f_{pm} \rho_m u_m^2 = -\frac{2}{D} f_{pm} \frac{\dot{m}^2}{\rho_m} \quad (6.63)$$

où le coefficient de frottement pariétal f_{pm} dépend du régime d'écoulement :

$$f_{pm} = 0,079 \left(\frac{\dot{m}D}{\mu_m} \right)^{-0,25} \quad \text{si} \quad Re_m = \frac{\dot{m}D}{\mu_m} > 2000 \quad (6.64)$$

$$f_{pm} = \frac{16}{Re_m} \quad \text{si} \quad Re_m = \frac{\dot{m}D}{\mu_m} < 2000$$

L'évaluation de la viscosité du mélange diffère selon les auteurs μ_m :

$$\mu_m = R_v \mu_v + R_l \mu_l \quad \text{ou} \quad \mu_m = x \mu_v + (1-x) \mu_l \quad \text{ou} \quad \frac{\mu_m}{\rho_m} = \frac{x \mu_v}{\rho_v} + \frac{(1-x) \mu_l}{\rho_l} \quad (6.65)$$

La première de ces relations est la plus utilisée (McAdams *et al*, 1942). Le modèle homogène donne des résultats assez précis mais dans des cas très limités. Il faut l'utiliser avec précaution. Le

meilleur accord avec l'expérience est obtenu pour des écoulements à bulles ou à gouttelettes quand la vitesse de glissement entre les phases est faible devant la vitesse moyenne de l'écoulement.

6.2.4.3 Modèle à flux de dérive

Les modèles à flux de dérive sont utilisables en écoulement à bulles et en écoulement à poches et bouchons. Les deux équations de conservation de la quantité de mouvement de chacune des phases sont remplacées par une équation pour le mélange et une relation phénoménologique permettant de relier la vitesse des deux phases.

Modèle de Wallis

Le flux de dérive du gaz est défini par : $j_{lv} = R_v(u_l - u_m)$. Wallis (1969) propose une expression du flux de dérive du gaz pour un écoulement à bulles en fonction de la vitesse terminale des bulles V_∞ :

$$j_{lv} = V_\infty R_v (1 - R_v) \quad n > 1 \quad (6.66)$$

Modèle de Zuber et Findlay

Zuber et Findlay (1965) proposent une relation entre la vitesse moyenne du gaz et celle du mélange pour des écoulements turbulents à bulles et à poches et bouchons :

$$u_v = C_0 u_m + u_\infty = C_0 (j_l + j_v) + u_\infty \quad (6.67)$$

– bulles :

$$C = 1,1 \quad u = 1,53 \left[\frac{g(\rho - \rho')\sigma}{\rho} \right]$$

– poches et bouchons :

$$C_0 = 1,2 \quad u_\infty = C_\infty \sqrt{gD}$$

avec $C_\infty = 0,35$ en écoulement vertical et $C_\infty = 0,5$ en écoulement horizontal.

L'équation (6.60) permet de calculer le taux de vide et l'équation (6.60) de bilan de la quantité du mouvement du mélange permet de calculer le gradient de pression après modélisation du frottement pariétal. En écoulement intermittent, le frottement pariétal est calculé en fonction de la vitesse moyenne du liquide :

$$\tau_p = -\frac{1}{2} f_{pl} \rho_l u_l^2 \quad (6.68)$$

$$\text{si } Re_l < 2000 \quad f_{pl} = 16/Re_l \quad \text{avec} \quad Re_l = \frac{u_l D}{\nu_l}$$

$$\text{si } Re_l > 2000 \quad f_{pl} = \frac{0,079}{Re_l^{1/4}}$$

Pour les écoulements intermittents, pour une meilleure prédiction, il est aussi recommandé d'utiliser le modèle cellulaire proposé par Fabre et Liné (1992) permettant de décrire le comportement des poches de gaz et des bouchons de liquide.

6.2.4.4 Modèle d'écoulement annulaire vertical sans arrachage

Pour les écoulements annulaires ou stratifiés, la vitesse des deux phases est contrôlée par le frottement interfacial. Il est donc nécessaire pour traiter ces écoulements d'utiliser un modèle complet « à deux fluides » avec deux équations de quantité de mouvement pour chacune des phases. On détaillera par la suite, le modèle d'écoulement annulaire dans un tube vertical de diamètre D . On suppose qu'il n'y a pas d'entraînement de gouttelettes de liquide dans la phase gazeuse. L'épaisseur d du film liquide s'écoulant à la paroi et le périmètre interfacial S_i peuvent être reliés au taux de gaz moyen dans la section :

$$d = \frac{D}{2}(1 - \sqrt{R_v}) \quad S_i = \pi D \sqrt{R_v} \quad (6.69)$$

Les équations de bilan de la quantité de mouvement pour le gaz et le liquide s'écrivent en écoulement permanent :

$$\frac{\partial \rho_v R_v u_v^2}{\partial z} = \frac{d}{dz} \frac{\dot{m}^2 x^2}{\rho_v R_v} = -R_v \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\tau_{iv} S_i}{A} - \dot{M}_v u_{vi} - \rho_v R_v g \quad (6.70)$$

$$\frac{\partial \rho_l R_l u_l^2}{\partial z} = \frac{d}{dz} \frac{\dot{m}^2 (1-x)^2}{\rho_l R_l} = -R_l \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\tau_{il} S_i}{A} + \frac{\tau_{pl} S_p}{A} + \dot{M}_v u_{li} - \rho_l R_l g$$

Les deux inconnues principales sont R_v et la pression p . Il est possible de les déterminer à condition de se donner des lois de fermeture pour u_{vi} , u_{li} , \dot{M}_v ou \dot{M}_l , τ_{vi} , τ_{li} . Les vitesses moyenne du liquide et de la vapeur à l'interface sont proches l'une de l'autre et voisines de la vitesse moyenne du liquide dans la section u_l . \dot{M}_v ou \dot{M}_l sont déduits des équations (6.47) de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho_v R_v u_v}{\partial z} = \dot{m} \frac{dx}{dz} = -\dot{M}_v \quad (6.71)$$

Le frottement interfacial peut être modélisé par la corrélation de Wallis (1969) en écoulement annulaire :

$$\tau_{iv} = \frac{1}{2} f_i (u_v - u_l) |u_v - u_l| \quad f_i = 0,005 \left(1 + 300 \frac{d}{D} \right) \quad (6.72)$$

Pour un modèle plus complet, on peut calculer l'épaisseur du film de liquide en se donnant une allure du profil des vitesses dans le film et en intégrant ce profil pour retrouver la vitesse moyenne u_l du liquide.

Si les vitesses des gaz deviennent suffisamment importantes, il y aura arrachage de gouttelettes de liquide. Dans ce cas, il est nécessaire d'introduire une équation de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour la phase liquide sous forme de gouttelettes. De nouvelles lois de fermeture pour les termes d'interaction entre le film de liquide et les gouttelettes (taux d'arrachage et de redéposition) et entre les gouttelettes et la phase gazeuse (force de traînée, taux de vaporisation) devront être introduites. Le modèle annulaire peut également être utilisé dans la configuration d'écoulement annulaire inverse, lorsque la vapeur mouille la paroi du tube à très haute température.

6.2.4.5 Modèle de Lockhart et Martinelli

Ce modèle permet de calculer le frottement pariétal pour des configurations d'écoulement variées. Le gradient de pression par frottement en écoulement diphasique est exprimé en fonction du gradient de pression par frottement en écoulement monophasique liquide ou gaz pondéré par un multiplicateur :

$$\begin{aligned} \left(\frac{dp}{dz} \right)_{fr} &= -\frac{\tau_p S_p}{A} = \phi_l^2 \left(\frac{dp}{dz} \right)_l = \phi_v^2 \left(\frac{dp}{dz} \right)_v \\ \left(\frac{dp}{dz} \right)_l &= -\frac{S_p}{A} f_{pl} \frac{\rho_l j_l^2}{2} \quad \left(\frac{dp}{dz} \right)_v = -\frac{S_p}{A} f_{pv} \frac{\rho_v j_v^2}{2} \\ f_{pl} &= K \left(\frac{j_l D_h}{v_l} \right)^{-n} \quad f_{pv} = K \left(\frac{j_v D_h}{v_v} \right)^{-n} \quad D_h = 4 \frac{A}{S_p} \end{aligned} \quad (6.73)$$

$\left(\frac{dp}{dz} \right)_l$ représente le gradient de pression d'un écoulement monophasique de liquide ayant une vitesse superficielle j_l . $\left(\frac{dp}{dz} \right)_v$ est le gradient de pression d'un écoulement monophasique de gaz ayant une vitesse superficielle j_v . Les constantes K et n sont déterminées par les corrélations de Poiseuille et de Blasius : en écoulement laminaire $K = 16$, $n = 1$ et en écoulement turbulent $K = 0,079$, $n = 0,25$.

Lockhart et Martinelli (1949) ont proposé une corrélation permettant de déterminer les multiplicateurs diphasiques ϕ_l^2 et ϕ_v^2 . A partir d'une série d'expériences sur des écoulements adiabatiques en tube horizontal, ils proposent les relations suivantes pour ϕ_l^2 et ϕ_v^2 :

$$\phi_l^2 = \left(1 + \frac{C}{X} + \frac{1}{X^2} \right) \quad \phi_v^2 = \left(1 + CX + X^2 \right) \quad (6.74)$$

où X est le paramètre de Martinelli :

$$X = \left[\left(\frac{dp}{dz} \right)_l / \left(\frac{dp}{dz} \right)_v \right]^{1/2} = \frac{1-x}{x} \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_l} \frac{f_{pl}}{f_{pv}}} \quad (6.75)$$

La valeur de C dépend du régime d'écoulement laminaire ou turbulent de chaque phase (tableau 6.1).

Liquide	Gaz	C
Turbulent	Turbulent	20
Laminaire	Turbulent	12
Turbulent	Laminaire	10
Laminaire	Laminaire	5

Tableau 6.1 – Valeurs de la constante C dans les multiplicateurs diphasiques.

A partir des équations (6.73) à (6.75), on peut déduire la valeur de ϕ_l^2 ou ϕ_v^2 et calculer le gradient de pression par frottement en écoulement diphasique. Ce modèle donne des résultats relativement précis pour une grande variété d'écoulements diphasiques en tube circulaire ou dans des géométries simples. Une autre corrélation proposée par Friedel (1979) permet également d'évaluer les multiplicateurs de Martinelli. Elle est basée sur 25 000 points expérimentaux. Müller-Steinhagen et Heck (1986) proposent également une corrélation du gradient de pression par frottement qu'ils comparent à plusieurs autres corrélations de la littérature. Quiben et Thome (2007) ont établi, pour des écoulements horizontaux, une modélisation faisant intervenir la configuration de l'écoulement. Ces différents modèles hydrodynamiques peuvent être utilisés pour calculer l'évolution des écoulements diphasiques liquide-vapeur en ébullition ou en condensation convective. Les lois de fermetures pour les flux de chaleur en paroi sont données dans les chapitres relatifs à l'ébullition et à la condensation (Tome II, Partiel).

6.3 MODÉLISATION DE LA SOLIDIFICATION D'UN MÉLANGE BINAIRE

La modélisation macroscopique de la solidification dendritique colonnaire a fait l'objet d'un grand nombre de travaux ces dernières décennies (Beckermann et Viskanta, 1993 ; Beckermann et Wang, 1996 ; Prescott et Incropera, 1996). L'un des principaux défis à relever réside pour partie dans l'amélioration de la description des mécanismes de transport aux différentes échelles qui caractérisent la zone de croissance colonnaire. Dans la plupart des représentations moyennées, cette zone est assimilée à un milieu poreux où les équations de conservation sont obtenues à l'aide de la théorie des mélanges (Hills *et al*, 1983 ; Prescott *et al*, 1991) ou par des techniques d'homogénéisation et plus particulièrement la méthode de prise de moyenne volumique (Beckermann, 1987 ; Bousquet-Melou *et al*, 2002 ; Goyeau *et al*, 2004). Compte tenu de sa capacité à incorporer les informations concernant la microstructure dans les équations moyennées et les propriétés effectives de transport (perméabilité, conductivité, coefficients de diffusion-dispersion), la méthode de prise de moyenne volumique est la plus utilisée pour l'établissement des modèles macroscopiques. Cette technique consiste à intégrer les équations locales sur un volume élémentaire représentatif de la région « poreuse » où les équations moyennées ainsi obtenues prennent en compte les interactions entre phases à travers un certain nombre de termes interfaciaux associés aux propriétés effectives de transport.

Compte tenu de la complexité géométrique des dendrites, les propriétés effectives sont souvent représentées par des lois de fermetures semi-empiriques peu adaptées à une description réaliste des mécanismes. C'est par exemple le cas de la perméabilité (utilisation de la relation de Kozeny-Carman)

ou encore du transport de soluté caractérisé par des coefficients de diffusion des phases liquide et solide très différents. Dans ce dernier cas, le transfert d'espèces dans la phase solide est généralement considéré comme très rapide (règle du Levier) ou très lent (modèle de Scheil). Le modèle de Scheil suppose une diffusion nulle dans la phase solide et le coefficient de diffusion effectif du soluté ne dépend que du coefficient de diffusion moléculaire de la phase liquide et de la fraction volumique liquide. Une alternative consiste à proposer un modèle dendritique « hors équilibre » massique à trois phases où les échanges interfaciaux de soluté sont pris en compte. Ces derniers sont proportionnels à la différence entre les concentrations interfaciales moyennes C^* et la moyenne volumique intrinsèque de la concentration $\langle C \rangle$ (Nie et Beckermann, 1991 ; Wang et Beckermann, 1993b) :

$$\phi_k = h_k \left(C_k^* - \langle C \rangle^k \right) \quad (6.76)$$

où h_k désigne le coefficient d'échange interfacial pour la phase k. Il est généralement admis que ce coefficient d'échange dépend principalement de la longueur de diffusion du soluté. Les problèmes de fermeture permettent quant à eux de mettre en évidence la dépendance généralement significative des propriétés effectives de transport en fonction de la tortuosité et de la dispersion locale.

Enfin, bien que la zone de croissance dendritique soit caractérisée par des variations spatiales de sa géométrie, la méthode de prise de moyenne volumique a généralement été appliquée sans considérer cette difficulté qui, dans certains cas, remet en cause la nécessaire séparation des échelles, et donc le sens de la méthode elle-même (Goyeau *et al.*, 1997).

Cette brève introduction permet de mettre l'accent sur le fait que l'amélioration des modèles de croissance passe nécessairement par une meilleure prise en compte du caractère multi-échelle du problème en incorporant, autant que faire se peut dans les modèles macroscopiques, la microstructure (tortuosité) de la géométrie et les phénomènes physiques locaux (dispersion locale, échanges interfaciaux, etc.). Un des objectifs de ce chapitre consiste à répondre partiellement à ces défis notamment en utilisant la méthode de prise de moyenne volumique avec *fermeture*. Selon les travaux de Wang et Beckermann (1993b) et de Quintard et Whitaker (1994), le transport de soluté est basé sur une description hors équilibre massique conduisant à des mécanismes de dispersion active. Dans ce chapitre, l'influence des hétérogénéités évolutives sur la mise à l'échelle des mécanismes est discutée.

6.3.1 Prise de moyenne volumique

Le modèle macroscopique de solidification colonnaire d'un mélange binaire est obtenu à l'aide de la méthode de prise de moyenne volumique (Whitaker, 1999) dont les principaux théorèmes sont rappelés ci-dessous. Soit ϕ_k une quantité physique associée à la phase k, on définit la moyenne volumique superficielle de ϕ_k dans le volume de prise de moyenne V sous la forme :

$$\langle \phi_k \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_k} \phi_k(x+y) dV \quad (6.77)$$

où V_k est le volume de la phase k contenu dans V (Fig. 6.4).

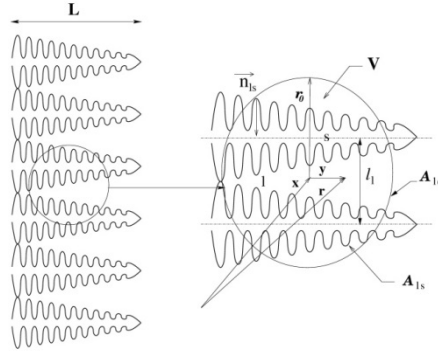


Fig. 6.4 – Volume de prise de moyenne.

Souvent la moyenne intrinsèque est plus représentative :

$$\langle \phi_k \rangle^k = \frac{1}{V_k} \int_{V_k} \phi_k(x+y) dV \quad (6.78)$$

Dans ces conditions, les moyennes intrinsèque et superficielle sont reliées par :

$$\langle \phi_k \rangle = \varepsilon_k \langle \phi_k \rangle^k \quad (6.79)$$

où ε_k est la fraction volumique de la phase k. Enfin, les équations macroscopiques peuvent être obtenues en appliquant les théorèmes de prise de moyenne suivants :

$$\langle \nabla \phi_k \rangle = \nabla \langle \phi_k \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ik} \phi_k dA \quad (6.80)$$

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{A}_k \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{A}_k \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ik} \mathbf{A}_k dA \quad (6.81)$$

$$\left\langle \frac{\partial \phi_k}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \phi_k \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ik} \mathbf{u}_i \phi_k dA \quad (6.82)$$

où \mathbf{u}_i désigne la vitesse de l'interface et \mathbf{n}_{ik} est la normale extérieure à l'interface.

6.3.2 Problème local

On considère une zone de croissance colonnaire au sein de laquelle est représenté un volume de prise de moyenne V où r_0 désigne le rayon de ce dernier et l_p l'espacement interdendritique. L'écoulement du mélange binaire au sein de la structure dendritique est supposé laminaire et incompressible et le transport solide négligé. Les propriétés physiques du mélange sont supposées constantes et les variations de la masse volumique dans les forces de volume obéissent à l'approximation de Boussinesq. Le problème local décrivant la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, du soluté et de l'énergie dans chacune des phases au sein du volume de prise de moyenne s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} = 0 \quad \text{dans la phase s} \quad (6.83)$$

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{u}_l) = 0 \quad \text{dans la phase l} \quad (6.84)$$

$$\frac{\partial (\rho_l \mathbf{u}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\nabla p_l + \mu_l \nabla^2 \mathbf{u}_l + \rho_l \mathbf{g} \quad \text{dans la phase l} \quad (6.85)$$

$$\frac{\partial (\rho_s C_s)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{J}_s) \quad \text{dans la phase s} \quad (6.86)$$

$$\frac{\partial (\rho_l C_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l C_l \mathbf{u}_l) = -\nabla \cdot (\mathbf{J}_l) \quad \text{dans la phase l} \quad (6.87)$$

$$\frac{\partial (\rho_s h_s)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\dot{\mathbf{q}}_s) \quad \text{dans la phase s} \quad (6.88)$$

$$\frac{\partial (\rho_l h_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l h_l \mathbf{u}_l) = -\nabla \cdot (\dot{\mathbf{q}}_l) \quad \text{dans la phase l} \quad (6.89)$$

où \mathbf{u}_l désigne la vitesse du mélange, C_k est la fraction massique du constituant p et h_k l'enthalpie massique dans la phase k . Les flux de chaleur et de masse sont respectivement définis par $\dot{\mathbf{q}}_k = -\lambda_k \nabla T_k$ et $\mathbf{J}_k = -\rho_k D_k \nabla C_k$ pour $k = l, s$. Les conservations de la masse, de la quantité de mouvement, des espèces et de l'énergie à l'interface A_i ont pour expression :

$$\rho_l \mathbf{n}_{ik} \cdot (\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_i) = \rho_s \mathbf{n}_{ik} \cdot (-\mathbf{u}_i) \quad \text{en } A_i \quad (6.90)$$

$$\mathbf{n}_{ik} \cdot [\rho_l C_l (\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_i) + \mathbf{J}_l] = \mathbf{n}_{ik} \cdot [\rho_s C_s (-\mathbf{u}_i) + \mathbf{J}_s] \quad \text{en } A_i \quad (6.91)$$

$$\mathbf{n}_{ik} \cdot [\rho_l h_l (\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_i) + \dot{\mathbf{q}}_l] = \mathbf{n}_{ik} \cdot [\rho_s h_s (-\mathbf{u}_i) + \dot{\mathbf{q}}_s] \quad \text{en } A_i \quad (6.92)$$

À l'équilibre thermodynamique à l'interface A_i , le couplage entre les températures locales (T_s et T_l) et les concentrations est obtenu par l'intermédiaire des fonctions (g_s et g_l) qui décrivent les courbes de solidus et de liquidus du diagramme de phase :

$$C_k = g_k(T_k) \quad k = l, s \quad \text{en } A_i \quad (6.93)$$

Enfin, si A_{ke} représente l'aire des surfaces des phases k en contact avec l'extérieur du volume V , les conditions limites en A_{ke} s'écrivent :

$$\mathbf{u}_l = F_v(\mathbf{r}, t) \text{ sur } A_{le} \quad (6.94)$$

$$C_k = M_k(\mathbf{r}, t) \quad k = l, s \quad \text{sur } A_{ke} \quad (6.95)$$

$$T_k = N_k(\mathbf{r}, t) \quad k = l, s \quad \text{sur } A_{ke} \quad (6.96)$$

où les fonctions F , M et N sont inconnues à cette étape. Leur forme sera discutée ultérieurement.

6.3.3 Considérations géométriques

La méthode de prise de moyenne volumique est une technique de changement d'échelle généralement utilisée pour des systèmes poreux au sein desquels la séparation des échelles caractéristiques est respectée (Whitaker, 1969). Les structures dendritiques colonnaires sont caractérisées par des propriétés effectives qui varient de manière continue dans l'espace. Dans ces conditions, on montre que la séparation des échelles dépend du taux de variation de la géométrie (Goyeau *et al*, 1997). Pour de faibles variations spatiales de la géométrie, la zone de croissance peut être considérée homogène et les propriétés effectives sont constantes quelle que soit la taille du volume de prise de moyenne. Pour de grand taux de variation de la géométrie, la séparation des échelles n'est pas satisfaite et une représentation interfaciale « alternative » doit être envisagée (volume de prise de moyenne déformable (Cushman, 1984), conditions de saut (Ochoa-Tapia et Whitaker, 1995). Entre ces deux limites (taux de variation modéré), bien que moins nette, la séparation des échelles reste dans une certaine mesure satisfaite et prend la forme :

$$l_p \ll L \quad (6.97)$$

Dans ces conditions la procédure de prise de moyenne volumique peut être utilisée mais deux difficultés persistent. D'une part les propriétés effectives ne sont pas seulement dépendantes du point mais dépendent également de la taille du volume de prise de moyenne. D'autre part, comment nous le verrons plus tard, les équations de conservation macroscopiques font intervenir des termes supplémentaires impliquant des gradients de porosité que l'on retrouve a fortiori dans les problèmes de fermeture associés, rendant la résolution de ces derniers particulièrement complexe (forme non locale).

6.3.4 Equations moyennées

Si l'on considère que la contrainte donnée par l'équation (6.97) est satisfaite, l'application des théorèmes de prise de moyenne au système d'équations (6.83)-(6.96) et l'utilisation de la décomposition spatiale de Gray (1975) :

$$\phi_k = \langle \phi_k \rangle^k + \tilde{\phi}_k \quad k = l, s \quad (6.98)$$

où $\langle \phi_k \rangle^k$ et $\tilde{\phi}_k$ représentent respectivement la moyenne intrinsèque et la déviation de la quantité générique ϕ_k associée à la phase k. On obtient ainsi le système macroscopique *non fermé* ci-dessous.

6.3.4.1 Conservation de la masse et de la quantité de mouvement

La prise de moyenne volumique de la conservation de la masse à l'interface solide-liquide (6.90) conduit à :

$$\sum_{k=l}^s \dot{m}_k = 0 \quad (6.99)$$

où \dot{m}_k désigne le taux de changement de phase (fusion ou solidification) dont la définition est donnée par :

$$\dot{m}_k = -\frac{1}{V} \int_{A_i} \rho_k \mathbf{n}_{ik} \cdot (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) dA \quad (6.100)$$

Rappelons que le transport solide n'est pas considéré et que la vitesse \mathbf{u}_s due à la dilatation volumique est négligeable devant la vitesse d'interface \mathbf{u}_i . Dans ces conditions, l'équation de conservation de la masse du mélange prend la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \rho_l + \varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{u}_l \rangle^l) = 0 \quad (6.101)$$

De la même manière, la prise de moyenne volumique de l'équation de Navier-Stokes conduit, après quelques simplifications, à la forme macroscopique non fermée suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\varepsilon_l \rho_l \langle u_l \rangle^l \right) + \nabla \cdot \left(\varepsilon_l \rho_l \langle u_l \rangle^l \langle u_l \rangle^l \right) + \nabla \cdot \left(\varepsilon_l \rho_l \langle \tilde{u}_l \tilde{u}_l \rangle^l \right) \\ & + \frac{1}{V} \int_{A_i} n_{ls} \cdot (u_l - u_i) \rho_l u_l dA = -\varepsilon_l \nabla \langle p_l \rangle^l + \varepsilon_l \mu_l \nabla^2 \langle u_l \rangle^l + \varepsilon_l \rho_l g \\ & + \frac{1}{V} \int_{A_i} n_{ls} \cdot (-p_l I - \mu_l \nabla \tilde{u}_l) dA + \mu_l \nabla \cdot \left(\frac{1}{V} \int_{A_i} n_{ls} \cdot \tilde{u}_l dA \right) \end{aligned} \quad (6.102)$$

6.3.4.2 Equation de conservation des espèces

L'une des originalités de la modélisation que nous présentons consiste à considérer la diffusion du soluté dans la phase solide ce qui conduit, à l'échelle macroscopique, à une représentation hors équilibre au sein du volume de prise de moyenne. Autrement dit, le transfert de soluté est décrit dans chacune des phases solide et liquide. Dans ces conditions, la mise à l'échelle des équations (6.86) et (6.87) conduit aux formes macroscopiques non fermées suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \langle C_s \rangle^s) + \frac{1}{V} \int_{A_i} \rho_s C_s \mathbf{n}_{ls} \cdot (-\mathbf{u}_i) dA = \\ \varepsilon_s \rho_s \nabla \cdot (D_s \nabla \langle C_s \rangle^s) + \frac{\rho_s D_s}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot \nabla \tilde{C}_s dA + \nabla \cdot \left(\frac{\rho_s D_s}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot \tilde{C}_s dA \right) \end{aligned} \quad (6.103)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \rho_l \langle C_l \rangle^l) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle C_l \rangle^l \langle u_l \rangle^l) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle \tilde{C}_l \tilde{u}_l \rangle^l) + \frac{1}{V} \int_{A_i} \rho_l C_l \mathbf{n}_{ls} \cdot (u_l - u_i) dA \\ = \varepsilon_l \rho_l \nabla \cdot (D_l \nabla \langle C_l \rangle^l) + \frac{\rho_l D_l}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot \nabla \tilde{C}_l dA + \nabla \cdot \left(\frac{\rho_l D_l}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot \tilde{C}_l dA \right) \end{aligned} \quad (6.104)$$

6.3.4.3 Equation de conservation de l'énergie

De la même manière, la prise de moyenne des équations (6.88) et (6.89) conduit aux équations macroscopiques non fermées suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \langle h_s \rangle^s) + \frac{1}{V} \int_{A_i} \rho_s H_s \mathbf{n}_{sl} \cdot (-\mathbf{u}_i) dA = \\ \nabla \cdot (\varepsilon_s \lambda_s \nabla \langle T_s \rangle^s) + \frac{\lambda_s}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{sl} \cdot \nabla T_s dA + \nabla \cdot \left(\frac{\lambda_s}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{sl} \cdot T_s dA \right) \end{aligned} \quad (6.105)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \rho_l \langle h_l \rangle^l) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle h_l \rangle^l \langle u_l \rangle^l) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle \tilde{h}_l \tilde{u}_l \rangle^l) + \frac{1}{V} \int_{A_i} \rho_l h_l \mathbf{n}_{ls} \cdot (u_l - u_i) dA \\ = \nabla \cdot (\varepsilon_l \lambda_l \nabla \langle T_l \rangle^l) + \frac{\lambda_l}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot \nabla T_l dA + \nabla \cdot \left(\frac{\lambda_l}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot T_l dA \right) \end{aligned} \quad (6.106)$$

où $\langle H \rangle = (\varepsilon_l \rho_l \langle H_l \rangle + \varepsilon_s \rho_s \langle H_s \rangle) / \langle \rho \rangle$ représente l'enthalpie du mélange.

Compte tenu des nombres de Lewis caractéristiques des alliages métalliques ($Le \sim 10^4$), les phases liquide et solide peuvent être considérées en équilibre thermique au sein du volume de prise de moyenne et une seule température moyenne peut être considérée $\langle T_l \rangle^l$; $\langle T_s \rangle^s$; $\langle T \rangle$ (Whitaker, 1999 ; Quintard et Whitaker, 1995). Par conséquent, l'addition des équations (6.105) et (6.106) et la prise en

compte de la condition limite donnée par l'équation (6.92) conduit à l'équation macroscopique de conservation de l'énergie non fermée suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle \langle h \rangle) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle h_l \rangle' \langle u_l \rangle') + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle \tilde{h}_l \tilde{u}_l \rangle') = \\ \nabla \cdot [(\varepsilon_l \rho_l + \varepsilon_s \rho_s) \nabla \langle T \rangle] + \nabla \cdot \left(\frac{I}{V} \int_{A_i} (\lambda_s T_s \mathbf{n}_{ls} + \lambda_l T_l \mathbf{n}_{ls}) . dA \right) \end{aligned} \quad (6.107)$$

En toute rigueur, l'équation (6.107) a été obtenue après élimination de plusieurs moments géométriques généralement très faibles au sein des structures dendritiques (Goyeau, 1997). Rappelons que cette simplification permet entre autres d'extraire les quantités moyennes intrinsèques des intégrales de surface. Dans le système d'équations (6.101)-(6.104) et (6.107) les termes interfaciaux faisant intervenir les champs de déviation sont, en réalité, reliés aux propriétés effectives de transport de la structure dendritique colonnaire. Une fermeture de ce système s'avère donc nécessaire et pour ce faire, les problèmes de fermeture locaux associés doivent être établis afin d'exprimer les champs de déviation en fonction des quantités moyennes.

6.3.5 Fermeture

La première étape permettant l'établissement des problèmes de fermeture associés à chacune des équations de conservation consiste à écrire les différents problèmes aux déviations pour chacune des variables. Ces problèmes aux déviations sont obtenus en utilisant la décomposition de Gray dans les équations locales (6.83)-(6.89) et en soustrayant le système d'équations macroscopiques non fermées (6.101)-(6.104) et (6.107). Les formes obtenues, particulièrement complexes, sont dans un premier temps simplifiées en faisant une analyse d'ordre de grandeur des différents termes des équations sur la base de la contrainte d'échelle (6.97). D'autres simplifications sont adoptées en relation avec les considérations physiques suivantes :

1) les variations de volume dues aux phénomènes de dilatation où de contraction ont une influence négligeable sur les écoulements interdendritiques (Beckermann et Viskanta, 1993 ; Ganessan et Loirier, 1990) ;

2) le processus de changement de phase est suffisamment lent pour considérer que la vitesse d'interface est faible devant la vitesse du liquide (Bousquet-Melou *et al*, 2002) ;

3) les problèmes aux déviations sont considérés quasi-stationnaires (Quintard *et al*, 1994) ;

4) les températures et concentrations à l'interface peuvent être découplées à l'échelle des problèmes aux déviations (Bousquet-Melou *et al*, 2002).

L'établissement des problèmes de fermeture pour des structures poreuses homogènes ne pose généralement pas de difficulté majeure. Par contre, le cas des structures évolutives (région dendritique) s'avère beaucoup plus complexe. Cette complexité peut être illustrée en considérant par exemple le problème aux déviations associé à la pression et la vitesse. Ce dernier s'écrit, après quelques manipulations, sous la forme :

$$\nabla \cdot \tilde{u}_l = 0 \quad (6.108)$$

$$\rho_l \tilde{u}_l \cdot \nabla \tilde{u}_l = -\nabla \tilde{p}_l + \mu_l \nabla^2 \tilde{u}_l - \frac{1}{V} \int_{A_i} n_{ls} \cdot \left(-p_l I + \mu_l \nabla \tilde{u}_l \right) dA$$

$$- \underbrace{\mu_l \varepsilon_l \left(\nabla \varepsilon_l \cdot \nabla \langle u_l \rangle^l + \nabla^2 \varepsilon_l \langle u_l \rangle^l \right)}_{\text{terme source}} \quad (6.109)$$

$$\tilde{u}_l = - \underbrace{\langle u_l \rangle^l}_{\text{terme source}} \quad \text{sur } A_i \quad (6.110)$$

$$\tilde{u}_l = F_v(r, t) \quad \text{sur } A_{le} \quad (6.111)$$

Nous sommes ici confrontés à deux difficultés. Tout d'abord, les équations (6.109) et (6.110) comportent un certain nombre de termes sources de déviations dont certains font intervenir des variations spatiales de la fraction volumique liquide, ce qui rend le problème aux déviations non-local. Dans ces conditions, toute solution pour \tilde{p}_l et \tilde{u}_l serait de la forme :

$$p_l, \tilde{u}_l = G(\langle u_l \rangle^l, \nabla \varepsilon_l, \nabla^2 \varepsilon_l, \nabla^2 \langle u_l \rangle^l) \quad (6.112)$$

où G est une fonction faisant intervenir les variables de fermeture dont la détermination pour ce genre de problème s'avère particulièrement complexe. Toutefois, la contrainte (6.97) permet d'estimer que le terme source de l'équation (6.109) est négligeable devant le terme intégral, réduisant ainsi le problème aux déviations à sa forme classique (Whitaker, 1999). Il s'agit bien entendu d'une approximation car, compte tenu des variations continues de la géométrie, la condition (6.97) est plus ou moins satisfaite au sein de la zone dendritique. La seconde difficulté concerne la nature de la fonction $F_v(r, t)$ à l'interface A_{le} . Dans le cas d'un milieu homogène, le problème de fermeture est généralement résolu sur une cellule unitaire périodique (conditions de périodicité pour \tilde{p}_l et \tilde{u}_l). Une condition de conservation du débit serait probablement plus adaptée pour des structures dendritiques. Toutefois, il est bien connu que la condition limite (6.111) n'influence les champs de déviations que dans une région d'épaisseur l_p au sein du volume de prise de moyenne. Enfin, contrairement aux milieux poreux homogènes, les propriétés effectives de transport des structures dendritiques ne dépendent pas seulement de la position du volume de prise de moyenne, mais également de la taille de ce dernier car cette dépendance est liée au caractère évolutif des dendrites. Cependant, pour des variations spatiales modérées, il existe une gamme des valeurs de r_0 pour lesquelles les propriétés effectives sont quasiment constantes (Goyeau *et al*, 1997, 1999). En considérant les hypothèses ci-dessus, la forme simplifiée des problèmes aux déviations pour les différentes quantités s'écrivent sous la forme :

Quantité de mouvement

$$\nabla \cdot \tilde{u}_l = 0 \quad (6.113)$$

$$\rho_l \tilde{\mathbf{u}}_l \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}}_l = -\nabla p_l + \mu_l \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}_l - \frac{1}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot (-p_l \mathbf{I} + \mu_l \nabla \tilde{\mathbf{u}}_l) dA \quad (6.114)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_i = \underbrace{-\langle \mathbf{u}_i \rangle^i}_{\text{terme source}} \quad \text{sur } A_i \quad (6.115)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_l(\mathbf{r} + l_i) = \tilde{\mathbf{u}}_l(\mathbf{r}), \quad \tilde{p}_l(\mathbf{r} + l_i) = \tilde{p}_l(\mathbf{r}) \quad \text{avec } i = 1, 2, 3 \quad \text{sur } A_{le} \quad (6.116)$$

Concentrations

$$D_s \nabla^2 C_s - \varepsilon_s^{-1} \left(\frac{1}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot D_s \nabla C_s dA \right) = 0 \quad (6.117)$$

$$\mathbf{u}_l \cdot \nabla \tilde{C}_l + \underbrace{\tilde{\mathbf{u}}_l \nabla \langle C_l \rangle^l}_{\text{terme source}} = +D_l \nabla^2 \tilde{C}_l - \varepsilon_l^{-1} \left(\frac{1}{V} \int_{A_l} \mathbf{n}_{ls} \cdot D_l \nabla \tilde{C}_l dA \right) \quad (6.118)$$

$$\tilde{C}_l = \underbrace{C_l^* - \langle C_l \rangle^l}_{\text{terme source}} \quad \text{sur } A_i \quad (6.119)$$

$$\tilde{C}_k(\mathbf{r} + l_i) = \tilde{C}_k(\mathbf{r}) \quad \text{avec } k=l, s \quad i=1, 2, 3 \quad \text{sur } A_{ke} \quad (6.120)$$

Energie

$$\lambda_s \nabla^2 T_s - \lambda_s \varepsilon_s^{-1} \left(\frac{1}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot \nabla T_s dA \right) = 0 \quad (6.121)$$

$$\rho_l c_{pl} \mathbf{u}_l \cdot \nabla \tilde{T}_l + \underbrace{\rho_l c_{pl} \tilde{\mathbf{u}}_l \cdot \nabla \langle T \rangle}_{\text{terme source}} = \lambda_l \nabla^2 \tilde{T}_l - \lambda_l \varepsilon_l^{-1} \left(\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{ls} \cdot \nabla \tilde{T}_l dA \right) \quad (6.122)$$

$$\mathbf{n}_{ls} \cdot \lambda_s \nabla \tilde{T}_s - \mathbf{n}_{ls} \cdot \lambda_l \nabla \tilde{T}_l = \underbrace{\mathbf{n}_{ls} \cdot (\lambda_l - \lambda_s) \nabla \langle T \rangle}_{\text{terme source}} \quad \text{sur } A_i \quad (6.123)$$

$$\tilde{T}_s = \tilde{T}_l \quad \text{sur } A_i \quad (6.124)$$

$$\tilde{T}_k(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \tilde{T}_k(\mathbf{r}) \quad \text{avec } k = l, s \quad i = 1, 2, 3 \quad \text{sur } A_{ke} \quad (6.125)$$

où C_k^* dans la condition (6.119) représente la concentration moyenne interfaciale dans la phase k . Rappelons que le système ci-dessus est complété par la condition $\langle \tilde{\phi}_k \rangle^k = 0$, où $\tilde{\phi}_k$ représente un champ de déviation générique. La forme des termes sources macroscopiques dans les équations (6.115), (6.118), (6.119), (6.122) et (6.123) associés aux déviations $\tilde{\mathbf{u}}_l, \tilde{p}_l, \tilde{C}_k, \tilde{T}_k$ ($k=l, s$) permet de proposer les dépendances linéaires suivantes :

$$\tilde{\mathbf{u}}_l = \mathbf{M} \cdot \langle \mathbf{u}_l \rangle^l \quad (6.126)$$

$$\tilde{p}_l = \mu_l m \cdot \langle \mathbf{u}_l \rangle^l \quad (6.127)$$

$$\tilde{C}_s = \alpha_s \left(C_s^* - \langle C_s \rangle^s \right) \quad (6.128)$$

$$\tilde{C}_l = \mathbf{b}_l \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l + \alpha_l \left(C_l^* - \langle C_l \rangle^l \right) \quad (6.129)$$

$$\tilde{T}_k = \mathbf{e}_k \cdot \nabla \langle T \rangle \quad (6.130)$$

où M, m, b_k, α_k, e_k sont les variables de fermeture solutions des problèmes différentiels obtenus après introduction des expressions (6.126)-(6.130) dans les problèmes aux déviations (6.113)-(6.125). Le système (6.113)-(6.116) étant non linéaire, on peut montrer que la variable de fermeture M peut être décomposée en une contribution linéaire et une contribution inertielle, la première relevant de la perméabilité, la seconde étant reliée au coefficient de Forchheimer (Whitaker, 1996). Par souci de concision, les problèmes de fermeture ne sont pas présentés ici et nous renvoyons le lecteur aux références citées pour plus de détails les concernant.

6.3.6 Modélisation macroscopique fermée

Compte tenu des hypothèses 1) à 4) et des expressions (6.126)-(6.130), la forme fermée du modèle macroscopique de solidification colonnaire prend la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_l \rho_l) + \nabla \cdot (\rho_l \langle \mathbf{u}_l \rangle) = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s)}_{\text{taux de changement de phase}} \quad (6.131)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_l \langle \mathbf{u}_l \rangle) + \varepsilon^{-1} \nabla \cdot (\varepsilon^{-1} \rho_l \langle \mathbf{u}_l \rangle \langle \mathbf{u}_l \rangle) = & -\nabla \langle p_l \rangle^l + \rho_l \mathbf{g} - \mu_l \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle \mathbf{u}_l \rangle + \\ & \underbrace{\mu_l \varepsilon_l^{-1} \nabla^2 \langle \mathbf{u}_l \rangle - \mu_l \varepsilon_l^{-1} \nabla \varepsilon_l \cdot \nabla (\varepsilon_l^{-1} \langle \mathbf{u}_l \rangle)}_{\text{seconde correction de Brinkman}} - \underbrace{\mu_l \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{u}_l \rangle}_{\text{correction de Forchheimer}} \end{aligned} \quad (6.132)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s \langle C_s \rangle^s) - C_s^* \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) \\ & = \varepsilon_s \nabla \cdot (\rho_s D_s \nabla \langle C_s \rangle^s) + \underbrace{\rho_s h_{ms} (C_s^* - \langle C_s \rangle^s)}_{\text{échange interfacial}} - \nabla \cdot [\rho_s D_s (\nabla \varepsilon_s) (C_s^* - \langle C_s \rangle^s)] \end{aligned} \quad (6.133)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_l \rho_l \langle C_l \rangle^l) + \nabla \cdot (\rho_l \langle C_l \rangle^l \langle \mathbf{u}_l \rangle) - C_l^* \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot [\rho_l \mathbf{d}_l (C_l^* - \langle C_l \rangle^l)] - \rho_s \mathbf{u}_s \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l = \\ & \nabla \cdot [\rho_l \mathbf{D}_l \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l] - \rho_l D_l (\nabla \varepsilon_l) \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l + \underbrace{\rho_l h_{ml} (C_l^* - \langle C_l \rangle^l)}_{\text{échange interfacial}} - \nabla \cdot [\rho_l D_l (C_l^* - \langle C_l \rangle^l)] \end{aligned} \quad (6.134)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\langle \rho \rangle \langle h \rangle) + \nabla \cdot (\rho_l \langle h_l \rangle^l \langle \mathbf{u}_l \rangle) = \nabla \cdot [\mathbf{A}_{eff} \cdot \nabla \langle T \rangle] \quad (6.135)$$

où la vitesse est écrite en terme de vitesse superficielle (filtration). Le taux de changement de phase présent dans les équations (6.131), (6.133) et (6.134) est obtenu à partir de la prise de moyenne de la condition (6.91). Il a pour expression :

$$\begin{aligned} (C_l^* - C_s^*) \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) = & \rho_s h_{ms} (C_s^* - \langle C_s \rangle^s) + \rho_l h_{ml} (C_l^* - \langle C_l \rangle^l) + \rho_l \mathbf{u}_l \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l \\ & - \rho_l D_l (\nabla \varepsilon_l) \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l - \rho_s D_s (\nabla \varepsilon_s) \cdot \nabla \langle C_s \rangle^s \end{aligned} \quad (6.136)$$

Dans les équations (6.131)-(6.136), \mathbf{K} , \mathbf{F} , \mathbf{D}_k , \mathbf{A}_{eff} et h_{mk} ($k=l,s$) représentent les propriétés effectives de transport au sein de la zone de croissance dendritique colonnaire. Elles sont obtenues par la résolution numérique des problèmes différentiels associés aux variables de fermeture. Le tenseur \mathbf{K} dans l'équation (6.132) désigne la perméabilité qui dépend de la tortuosité de la structure dendritique locale et \mathbf{F} est le tenseur de Forchheimer qui tient compte des effets inertiels à l'échelle macroscopique. Les variables de fermeture dans les expressions (6.126) et (6.127) sont décomposées afin de distinguer la friction linéaire des effets inertiels ($\mathbf{M} = \mathbf{R} + \mathbf{S}$, et $\mathbf{m} = \mathbf{r} + \mathbf{s}$). Dans ces conditions, \mathbf{K} et \mathbf{F} s'écrivent sous la forme :

$$\varepsilon_l \mathbf{K}^{-l} = -\frac{I}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot (-\mathbf{I} \mathbf{r} + \nabla \mathbf{R}) dA \quad (6.137)$$

$$\varepsilon_l \mathbf{K}^{-l} \cdot \mathbf{F} = -\frac{I}{V_l} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot (-\mathbf{I} \mathbf{s} + \nabla \mathbf{S}) dA \quad (6.138)$$

A ce jour, la résolution numérique des problèmes de fermeture pour les variables \mathbf{S} et \mathbf{s} associées au coefficient de Forchheimer reste à réaliser. Le tenseur de diffusion-dispersion \mathbf{D}_l de l'équation (6.134) s'exprime sous la forme :

$$\mathbf{D}_l = \underbrace{\varepsilon_l D_l \mathbf{I}}_{\text{diffusion}} - \underbrace{(\tilde{\mathbf{u}}_l \mathbf{b}_l)}_{\text{dispersion}} \quad (6.139)$$

Le tenseur de conductivité effectif de l'équation (6.135) a quant à lui pour expression :

$$\mathbf{A}_{eff} = (\varepsilon_s \lambda_s + \varepsilon_l \lambda_l) \mathbf{I} + \underbrace{\frac{(\lambda_l - \lambda_s)}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot \mathbf{e}_l dA}_{\text{tortuosité}} - \underbrace{\langle \tilde{\mathbf{u}}_l \mathbf{e}_l \rangle}_{\text{dispersion}} \quad (6.140)$$

Enfin, les coefficients d'échange interfaciaux des équations (6.133) et (6.134) dus à la représentation hors équilibre à l'échelle macroscopique s'écrivent sous la forme :

$$h_{mk} = \frac{I}{V} \int_{A_i} \mathbf{n}_{ls} \cdot D_k \nabla \alpha_k dA \quad k = l, s \quad (6.141)$$

6.3.7 Conclusion et discussion

La comparaison entre le modèle macroscopique de solidification des mélanges binaires, établi rapidement dans ce cours, et ceux existants dans la littérature (Beckermann et Wang, 1995 ; Bennon et Incropera, 1996) appellent plusieurs commentaires. Tout d'abord, comme le montrent les expressions (6.137)-(6.141), l'ensemble des propriétés effectives de transport sont déterminées à partir de problèmes différentiels (problèmes de fermeture) qui peuvent être résolus sur des structures dendritiques réelles (Goyeau *et al*, 1999, Bousquet-Melou *et al*, 2002, Neculae *et al*, 2002) et non pas estimées à partir de relations empiriques généralement obtenues sur des géométries très différentes de la réalité. L'intérêt de ces fermetures réside précisément dans leur capacité à inclure l'ensemble des mécanismes locaux (tortuosité de la structure locale, phénomènes inertiels et dispersifs) dans les coefficients de transport macroscopiques. La deuxième caractéristique concerne la prise en compte des échanges interfaciaux de soluté au sein du volume de prise de moyenne. La forme des termes macroscopiques représentant ces échanges est similaire à celle introduite empiriquement par Ni et Beckerman (1991). La mise à l'échelle que nous présentons ici permet d'une part, d'établir rigoureusement les équations de conservation macroscopiques et, d'autre part, de déterminer avec

précision les coefficients d'échanges effectifs par résolution des fermetures associées (Bousquet-Melou, 2002). Ces auteurs mettent en effet en évidence que ces coefficients dépendent d'une part de la structure locale des dendrites mais également des écoulements au sein de la zone de croissance. Par ailleurs, la structure « évolutive » de cette dernière implique la présence de termes comprenant des gradients de porosité (comme par exemple la seconde correction de Brinkman dans l'équation de la quantité de mouvement, etc.) Bien que considérés comme étant du second ordre, l'estimation de ces derniers dans le contexte de la solidification reste à réaliser. Enfin, les équations (6.134) et (6.136) mettent en évidence des termes supplémentaires comprenant les coefficients u_l et d_l ayant pour expressions :

$$u_l = \frac{l}{V_l} \int_{A_l} n_{ls} \cdot D_l \nabla b_l dA \quad (6.142)$$

$$d_l = \langle \tilde{u}_l \alpha_l \rangle \quad (6.143)$$

Ces coefficients peuvent être interprétés comme des pseudo-vecteurs vitesses qui contribuent au transport convectif macroscopique du soluté (Quintard et Whitaker, 1994 ; Paine *et al*, 1983 ; Edwards *et al*, 1993). Selon les résultats obtenus dans le cadre de la contamination des sols, ces termes pourraient contribuer pour au moins 10 % du transport convectif global.

ANNEXE

Etablissement des équations phasiques locales

Considérons un volume $V(t)$ constitué d'un volume $V_1(t)$ de la phase 1 et d'un volume $V_2(t)$ de la phase 2 séparés par une interface A_i de contour C (Fig. A1). Le volume $V_1(t)$ est limité par l'interface et une surface $S_1(t)$ de normale \mathbf{n}_1 .

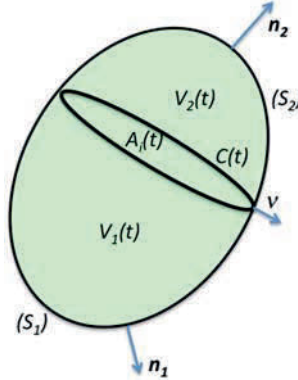


Fig. A 1 – Schéma du milieu diphasique

Soit une grandeur ϕ qui peut être la masse volumique ρ , la quantité de mouvement $\rho\mathbf{u}$ ou l'énergie totale $\rho\phi e + 1/2 u^2$, ϕ prend la valeur ϕ_k dans la phase k et la valeur ϕ_i sur l'interface. La conservation de la grandeur ϕ s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi dV &= \frac{d}{dt} \int_{V_1(t)} \phi_1 dV + \frac{d}{dt} \int_{V_2(t)} \phi_2 dV + \frac{d}{dt} \int_{A_i(t)} \phi_i dS \\ &= \int_{V_1(t)} \Pi_1 dV + \int_{V_2(t)} \Pi_2 dV + \int_{A_i(t)} \Pi_i dS - \int_{S_1(t)} \Gamma_1 \cdot \mathbf{n}_1 dS - \int_{S_2(t)} \Gamma_2 \cdot \mathbf{n}_2 dS - \int_{C(t)} \Gamma_i \cdot \mathbf{u} dl \end{aligned} \quad (\text{A } 15)$$

La variation de cette grandeur dans le volume $V(t)$ est due à des termes source Π_k et au flux Γ_k de la grandeur ϕ_k à travers la surface externe S_k . Avant de dériver les équations phasiques locales instantanées, il convient de rappeler un certain nombre de théorèmes.

Rappel de quelques théorèmes

– Règle de Leibnitz pour un volume $V(t)$ délimité par une surface $S(t)$ de normale \mathbf{n} dont les points se déplacent à une vitesse \mathbf{u} :

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t)} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{S(t)} \phi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS \quad (\text{A } 16)$$

Pour une interface, la règle de Leibnitz s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \int_{A_i} \phi_i dS = \int_{A_i} \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \phi_i \nabla_i \cdot \mathbf{u}_i \right) dS = \int_{A_i} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} dS + \int_C \phi_i \mathbf{u}_i \cdot d\mathbf{l} - \int_{A_i} 2\kappa \phi_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_{ik} dS \quad (\text{A } 17)$$

où κ est la courbure locale de l'interface et \mathbf{n}_{ik} la normale à l'interface dirigée vers l'extérieur de la phase k .

– Théorème de Gauss

$$\int_S \mathbf{F} n dS = \int_V (\nabla \cdot \mathbf{F}) dV \quad (\text{A } 18)$$

pour une surface, où \mathbf{n} est la normale au contour :

$$\int_C \phi_i \cdot \mathbf{v} dl = - \int_{A_i} [\nabla_i \phi_i - (\nabla_i \cdot \mathbf{n}_{ik}) \phi_i \mathbf{n}_{ik}] dS \quad (\text{A } 19)$$

Equations phasiques locales instantanées

Le terme de transport pour la grandeur ϕ_k s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V_k} \phi_k dV &= \int_{V_k} \frac{\partial \phi_k}{\partial t} dV + \int_{S_k} \phi_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k dS + \int_{A_i} \phi_k \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_{ik} dS \\ &= \int_{V_k} \frac{\partial \phi_k}{\partial t} dV + \int_{S_k \cup A_i} \phi_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k dS + \int_{A_i} \phi_k (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k) \mathbf{n}_{ik} dS \end{aligned} \quad (\text{A } 20)$$

En utilisant les théorèmes du paragraphe précédent, l'équation (A.20) devient :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1,2} \int_{V_k} \left[\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \mathbf{u}_k + \mathbf{F}_k) - \Pi_k \right] dV + \sum_{k=1,2} \int_{A_i} [\phi_k (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k) + \mathbf{F}_k] \cdot \mathbf{n}_{ik} dS \\ + \frac{d}{dt} \int_{A_i} \phi_i dS + \int_{A_i} \mathbf{F}_i dS + \int_C \mathbf{F}_i \mathbf{u} dl = 0 \end{aligned} \quad (\text{A } 21)$$

Cette équation se décompose en 3 équations phasiques : une pour chaque phase et une pour l'interface :

pour la phase k :

$$\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \mathbf{u}_k) = \Pi_k - \nabla \cdot (\mathbf{F}_k) \quad (\text{A } 22)$$

pour l'interface :

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_i \mathbf{u}_i) = \Pi_i + \nabla \cdot \mathbf{F}_i - 2\kappa \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{n}_{ik} + \sum_{k=1,2} [\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \mathbf{F}_k] \cdot \mathbf{n}_{ik} \quad (\text{A } 23)$$

L'interface étant sans masse, la grandeur ϕ_i est nulle pour les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. L'énergie interne de l'interface est également négligeable par rapport aux autres termes de l'équation de conservation de l'énergie. Il n'y a pas non plus au niveau de l'interface de terme source de masse, quantité de mouvement ou énergie, donc $\Pi_i = 0$. L'équation (A.23) peut donc s'écrire plus simplement :

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_i - 2\kappa \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{n}_{ik} + \sum_{k=1,2} [\phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) + \mathbf{F}_k] \cdot \mathbf{n}_{ik} = 0 \quad (\text{A } 24)$$